

00362



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

---

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS



posgrado en ciencias físicas  
u n a m

ESTUDIOS DE EVOLUCIÓN TEMPORAL Y  
PROPAGACIÓN ESPACIAL EN EL  
DECAIMIENTO CUÁNTICO

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO ACADÉMICO DE  
MAESTRA EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA

IRENE DE LOURDES  
MALDONADO SÁNCHEZ

DIRECTOR DE TESIS:  
DR. GASTÓN GARCÍA CALDERÓN

Abril de 2005

m342698



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

# Resumen

En este trabajo se realiza el estudio del problema de decaimiento de estados cuánticos arbitrarios confinados inicialmente en potenciales radiales de alcance finito. Este estudio se realiza mediante un formalismo basado en el desarrollo de la función de onda dependiente del tiempo en términos de estados resonantes, lo que permite analizar su dinámica mediante el uso de expresiones analíticas exactas. Se destaca la obtención de una expresión analítica para la función de onda dependiente del tiempo en la región externa del potencial,  $\Psi_{ex}(r, t)$ .

También se obtiene el comportamiento a tiempos largos de la función de onda y de sus probabilidades de supervivencia y no-escape a partir de las propiedades de las funciones  $M$  que las describen. Esto nos permite demostrar que el comportamiento de la función de onda en este régimen temporal es proporcional a  $t^{-3/2}$  y que, tanto la probabilidad de no-escape,  $P(t)$ , como la probabilidad de supervivencia,  $S(t)$ , se comportan en el tiempo como  $t^{-3}$ .

Otra de las aportaciones de nuestro estudio consiste en el desarrollo de una expresión equivalente, en el régimen de tiempos largos, para la función de onda de las regiones interna y externa del potencial. Esta expresión se obtiene aplicando el método de la fase estacionaria a la forma integral del propagador del sistema, ya sea de la región interna o externa, para obtener la contribución dominante en la región de interés. A partir de la expresión de la función de onda obtenida por este método, se derivan las expresiones para la probabilidad de supervivencia y para la probabilidad de no-escape obteniendo nuevamente el comportamiento  $t^{-3}$ . Estas expresiones representan un resultado general para el decaimiento de las ondas S de estados inicialmente confinados en la región interna de un potencial radial de alcance finito.

Para verificar las diversas expresiones analíticas desarrolladas, se realiza un estudio numérico del decaimiento en la región interna y externa de un potencial delta de Dirac. En el estudio numérico se verifica la excelente descripción que brindan las distintas expresiones analíticas al analizar el comportamiento de las cantidades  $\Psi_{in}(r, t)$ ,  $S(t)$ ,  $P(t)$  y  $\Psi_{ex}(r, t)$ .

A Má y a Pá, con mucho cariño...

A Carla y Edna, siempre...

A mi Tía Lidia, con mucho afecto...

A Jorge, mi complemento...

## Agradecimientos

Agradezco enormemente al Dr. Gastón García Calderón por haberme recibido como tesisista y haberme guiado hasta el final. Por su tiempo, paciencia, ayuda y apoyo incondicional. Por todas sus enseñanzas, no sólo con respecto a nuevos conocimientos, sino también en cómo hacer investigación científica.

Al Dr. Jorge Villavicencio por toda su ayuda y tiempo. Por sus consejos certeros y su visión objetiva. Por mostrarme con el ejemplo lo interesante y gratificante que puede ser el trabajo de investigación.

A los doctores Laura Viana, José Luis Mateos, Octavio Castaños y Jorge Villavicencio, miembros de mi Comité de Tesis, quienes dedicaron su valioso tiempo para revisar minuciosamente este manuscrito y enriquecerlo con sus sugerencias.

A Yanalté Herrero por su ayuda incondicional e invaluable para hacer esto posible.

Al CCMC y al IFUNAM por brindarme lo necesario para culminar exitosamente estos estudios. Al CONACyT y a la UNAM por el apoyo económico recibido.

# Contenido

<b>Lista de Figuras</b>	<b>vi</b>
<b>1 Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2 El Formalismo: Descripción para la Región Interna</b>	<b>7</b>
2.1 La Función de Onda de la Región Interna . . . . .	8
2.1.1 La función de onda en términos de la función de Green . . . . .	8
2.1.2 La función de Green saliente . . . . .	9
2.1.3 Obtención de la función de Green saliente: desarrollo en estados resonantes . . . . .	10
2.1.4 Determinación de la función de Green . . . . .	14
2.1.5 Determinación de la función de onda . . . . .	16
2.2 Las Probabilidades de Supervivencia y de No-Escape . . . . .	17
<b>3 Extensión del Formalismo a la Región Externa</b>	<b>19</b>
3.1 La Función de Onda de la Región Externa . . . . .	20
<b>4 Desarrollos a Tiempos Largos</b>	<b>22</b>
4.1 La Región Interna . . . . .	23
4.2 La Región Externa . . . . .	26
4.3 Método de la Fase Estacionaria para Evaluar a la Función de Onda . . . . .	27
<b>5 Aplicación del Formalismo</b>	<b>29</b>
5.1 El Potencial de Alcance Finito y la Función de Onda Inicial . . . . .	31
5.2 Cálculos en la Región Interna . . . . .	39
5.2.1 La función de onda a tiempos largos . . . . .	40
5.2.2 Las probabilidades de supervivencia, $S(t)$ , y de no-escape, $P(t)$ . . . . .	40
5.2.3 La aproximación de un solo polo . . . . .	44

5.2.4	El método de la fase estacionaria . . . . .	47
5.3	Cálculos en la Región Externa . . . . .	55
5.3.1	Comportamiento general de la función de onda. . . . .	58
5.3.2	Comportamiento exponencial de la función de onda y sus desviaciones a tiempos largos o distancias pequeñas. . . . .	68
5.3.3	La aproximación de un solo polo . . . . .	71
5.3.4	El método de la fase estacionaria . . . . .	72
<b>6</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>75</b>
<b>A</b>	<b>Desarrollo Asintótico para la Función <math>M(x, q, t)</math> para Tiempos Largos</b>	<b>80</b>
	<b>Bibliografía</b>	<b>82</b>

## Lista de Figuras

2.1	El contorno $C'$ en el plano $z$ . . . . .	13
2.2	El contorno de Bromwich $C_0$ en el plano $k$ . . . . .	15
5.1	Representación pictórica del potencial delta y del estado inicial . . . . .	32
5.2	Valores de los polos resonantes con respecto a la intensidad del potencial delta. . . . .	33
5.3	Módulo cuadrado de los tres primeros estados resonantes, $ u_n(r) ^2$ , usando los parámetros $\lambda = 10$ y $\lambda = 200$ . . . . .	35
5.4	Verificación de la regla de suma dada por la ecuación (2.44) . . . . .	37
5.5	Verificación de la regla de suma dada por la ecuación (2.45) . . . . .	38
5.6	Verificación de la regla de suma dada por la ecuación (2.46) . . . . .	39
5.7	Densidad de probabilidad en la región interna, $ \Psi_{in} ^2$ , como función de la posición. . . . .	41
5.8	Comparación entre la probabilidad de supervivencia y la probabilidad de no-escape para dos estados iniciales distintos. . . . .	43
5.9	Verificación de la aproximación de un solo polo para la función de onda de la región interna con $q = 1$ . . . . .	46
5.10	Verificación de la aproximación de un solo polo para la probabilidad de supervivencia con $q = 1$ . . . . .	47
5.11	Verificación de la aproximación de un solo polo para la probabilidad de no-escape con $q = 1$ . . . . .	48
5.12	Verificación de la aproximación de un solo polo para la función de onda de la región interna con $q = 2$ y $q = 5$ . . . . .	49
5.13	Verificación de la aproximación de un solo polo para la probabilidad de supervivencia con $q = 2$ y $q = 5$ . . . . .	50
5.14	Verificación de la aproximación de un solo polo para la probabilidad de no-escape con $q = 2$ y $q = 5$ . . . . .	51

5.15 Verificación de la igualdad del coeficiente $t^{-3/2}$ de la función de onda calculado con el formalismo de estados resonantes y con el método de la fase estacionaria. . . . .	53
5.16 Traslape entre la función de onda de la región interna y su cálculo a tiempos largos. . . . .	55
5.17 Traslape entre la probabilidad de supervivencia y su cálculo a tiempos largos. . . . .	56
5.18 Traslape entre la probabilidad de no-escape y su cálculo a tiempos largos. . . . .	57
5.19 Comparación de las funciones de onda interna y externa evaluadas en $r = a$ . . . . .	59
5.20 Evolucion de $ \Psi(r, t) $ como función de $r$ en la vecindad de la frontera $r = a$ . . . . .	61
5.21 Densidad de probabilidad como función de la posición. . . . .	62
5.22 Densidad de probabilidad como función de la posición. . . . .	63
5.23 Densidad de probabilidad como función de la posición. . . . .	64
5.24 Densidad de probabilidad como función del tiempo. . . . .	65
5.25 Densidad de probabilidad como función del tiempo para tres valores distintos de la posición. . . . .	66
5.26 Densidad de probabilidad como función del tiempo para un valor de $q = 5$ . . . . .	67
5.27 Densidad de probabilidad con respecto a la posición y su aproximación de la región exponencial y de las desviaciones a distancias pequeñas. . . . .	69
5.28 Densidad de probabilidad con respecto al tiempo y su aproximación de la región exponencial y de las desviaciones a tiempos largos. . . . .	70
5.29 Logaritmo de la densidad de probabilidad con respecto al tiempo y su aproximación de la región exponencial y de las desviaciones a tiempos largos. . . . .	71
5.30 Logaritmo de la densidad de probabilidad en el régimen de decaimiento exponencial y de desviaciones a tiempos largos, su aproximación de un solo polo y su comportamiento asintótico a tiempos largos. . . . .	72
5.31 Logaritmo de la densidad de probabilidad en $r = a$ y su aproximación de un solo polo. Se incluye también el comportamiento asintótico a tiempos largos. . . . .	73

## Capítulo 1

# INTRODUCCIÓN

En 1899, a tres años del descubrimiento de Beckerel de la radiactividad natural, Elster y Geitel [1] encontraron experimentalmente la razón de decaimiento exponencial en sustancias radiactivas. En 1900, Rutherford [2] introdujo el concepto de vida media al definir el tiempo de vida  $\tau$ , que es el tiempo al que una cierta cantidad de núcleos radiactivos  $N_0$  al tiempo  $t = 0$ , disminuye a la mitad de su valor original. En 1905, Schweidler [3] mostró la naturaleza estadística del decaimiento, la cual consiste en que la probabilidad de desintegración de un núcleo no depende de su momento de formación y el tiempo al que decae sólo puede predecirse estadísticamente. Esta idea fue verificada experimentalmente por Kohlrausch [4] en 1906. Experimentos posteriores mostraron además que el tiempo de vida  $\tau$  no depende de variables externas como la presión, la temperatura o el medio químico circundante. La ley de decaimiento exponencial puede escribirse como  $P(t) = N(t)/N_0 = \exp[-\Gamma t]$ , y describe la probabilidad  $P(t)$  de que un sistema haya decaído a un tiempo  $t$ .  $N(t)$  es el número de núcleos que no han decaído a ese tiempo y la cantidad  $\Gamma$  es conocida como la anchura de decaimiento, la cual se relaciona con el tiempo de vida  $\tau$  mediante  $\tau = \ln 2/\Gamma$ .

Con el advenimiento de la mecánica cuántica en 1928, Gamow [5, 6] y Gurney y Condon [7, 8] abordaron de manera simultánea el problema del decaimiento espontáneo de partículas  $\alpha$  en ciertos núcleos atómicos. El enfoque desarrollado por Gamow consistió en resolver la ecuación de Schrödinger para un sistema de partículas  $\alpha$  confinadas por un potencial efectivo de barrera resultado de la combinación de las fuerzas nucleares atractivas con las fuerzas de repulsión coulombianas en el núcleo. Gamow impuso la condición de frontera de onda saliente a grandes distancias del núcleo, lo que lo condujo a soluciones con eigenvalores complejos de la energía y a la definición de estados resonantes, para los cuales la densidad de probabilidad decae exponencialmente como función de tiempo. Gamow interpretó la parte imaginaria del eigenvalor de la energía como la anchura de decaimiento (o

constante de decaimiento),  $\Gamma/2$ , en el proceso de desintegración. Esto le permitió encontrar una relación entre la anchura de decaimiento y la energía de la partícula  $\alpha$  emitida, la cual coincidía con la fórmula experimental de Geiger-Nuttall [9]. También encontró que la razón de desintegración de las partículas obedece la ley de decaimiento exponencial dada por  $\exp(-t/\tau)$  donde nuevamente aparece el tiempo de vida,  $\tau$ , que en este planteamiento está dado por la relación  $\tau \simeq \hbar/\Gamma$ . Inicialmente, el enfoque de Gamow no fue bien recibido por Born, uno de los fundadores de la mecánica cuántica moderna, quién argumentaba que la hermiticidad del hamiltoniano del sistema debía conducir necesariamente a eigenvalores reales de la energía y no a eigenvalores complejos. Sin embargo, el éxito y las potenciales aplicaciones de este formalismo no podían ser ignorados, por lo que Born [10] abordó inmediatamente el problema utilizando operadores hermitianos y eigenfunciones con valores reales. Para esto, Born supuso que dentro del núcleo existe un conjunto discreto de estados estacionarios mientras que fuera de él, el potencial coulombiano tiene un espectro continuo que se traslapa con las energías discretas de adentro. Después, consideró estos dos conjuntos de funciones de onda como completos y expandió el paquete de onda inicial en términos de éstos para obtener los mismos resultados de la teoría de Gamow <sup>1</sup>.

Aún cuando la ley de decaimiento exponencial ha sido observada en diversos campos de la física, esta ley no es totalmente consistente con la mecánica cuántica, ya que como lo demostrara Khalfin en 1957 [11], existen desviaciones del decaimiento exponencial. En su trabajo pionero, Khalfin predice la existencia de un comportamiento no-exponencial del decaimiento en los regímenes de tiempos muy largos o muy cortos comparados con el tiempo de vida del sistema. Los trabajos teóricos [12, 13] que surgieron posteriormente, se enfocaron a describir este tipo de desviaciones mediante modelos unidimensionales que simulan el escape de una partícula inicialmente confinada en un núcleo. En este contexto destaca el trabajo desarrollado por Winter [13], quien en 1961 propone un modelo unidimensional simple para explorar el problema del decaimiento no-exponencial en donde una partícula puede escapar de la región de confinamiento mediante el tunelaje a través de una barrera de potencial. El modelo consiste en un estado inicial confinado a  $t = 0$  en la región interna de un potencial compuesto por una pared infinita en  $x = -a$  y una delta de Dirac  $\delta(x)$  en  $x = 0$ .

---

<sup>1</sup>Esto nos deja entrever que el que un hamiltoniano sea hermitiano o no (y que, por lo tanto, sus energías sean reales o complejas), depende enteramente de la base que utilicemos para resolver el problema.

A un tiempo  $t > 0$  la partícula inicialmente confinada en la región  $-a \leq x \leq 0$  empieza a escaparse del sistema. Dicho problema involucra la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo mediante un desarrollo de la función de onda en eigenfunciones de la energía, con una condición inicial dada por la eigenfunción de la partícula en una caja de paredes infinitas. Este planteamiento le permitió a Winter obtener una expresión integral para la función de onda dependiente del tiempo. Mediante un análisis de la corriente de probabilidad en  $x = 0$ , y con base en aproximaciones analíticas e integraciones numéricas. Winter demostró la existencia de pequeñas desviaciones del comportamiento exponencial para valores extremadamente pequeños y valores extremadamente grandes de  $t$  con respecto a la vida media del sistema. Una de las dificultades presentes en estos enfoques numéricos es el comportamiento altamente oscilatorio del integrando, lo cual dificulta el cálculo de la función de onda en puntos alejados de la región de interacción. Las limitaciones de los enfoques numéricos ha sido enfatizada por van Dijk, *et al.* [14], quienes han mostrado que éstos pueden resultar computacionalmente prohibitivos para valores grandes de la posición.

El interés por el estudio teórico de los aspectos dinámicos de las desviaciones no-exponenciales del decaimiento sigue vigente, ya que hace poco más de una década que dieron inicio los primeros intentos experimentales por verificar esta antigua predicción cuántica. En el contexto experimental, sólo se ha reportado la existencia de desviaciones no-exponenciales del decaimiento en el régimen de tiempos cortos en un sistema artificial [15, 16] consistente en átomos de sodio ultra-fríos confinados en un potencial óptico acelerado generado por dos láseres. Otros experimentos realizados en el contexto de decaimiento nuclear radiactivo, como los realizados por Norman *et al.* [17], han reportado resultados negativos en el régimen de tiempos cortos (hasta  $10^{-4}$  vidas medias ó  $10^{-4}t_{1/2}$ ) en sistemas como  $^{60}\text{Co}$ , y en el régimen de tiempos largos (hasta 45 vidas medias ó  $45t_{1/2}$ ) en  $^{56}\text{Mn}$ .

Para entender completamente el fenómeno del decaimiento cuántico, es preciso disponer de soluciones analíticas que exhiban de manera transparente el comportamiento de las cantidades físicas involucradas. A lo largo de estas líneas, García-Calderón [18], ha desarrollado un formalismo que permite explorar, con base en soluciones analíticas exactas, la evolución temporal del decaimiento cuántico. El enfoque se fundamenta en la solución de la ecuación radial de Schrödinger dependiente del tiempo para potenciales arbitrarios de alcance finito, utilizando la condición inicial a  $t = 0$  de un estado arbitrario,  $\Psi(r, 0)$ , localizado en la

región de interacción del potencial definido en el intervalo  $0 \leq r \leq a$ . Una aportación fundamental de este formalismo es que permite obtener expresiones analíticas para la función de onda dependiente del tiempo,  $\Psi(r, t)$ , en la región interna del potencial, así como de cantidades relevantes en el proceso de decaimiento como lo es la probabilidad de supervivencia,  $S(t) = |\int_0^a \Psi^*(r, 0) \Psi(r, t) dr|^2$ . Estas cantidades son expresadas en términos de desarrollos que involucran a los estados resonantes,  $u_n(r)$ , del sistema y sus correspondientes eigenvalores complejos de la energía,  $k_n^2$  [19]. Esto es, cada término del desarrollo puede ser expresado por coeficientes formados por el traslape del estado inicial con sus respectivos estados resonantes, multiplicados por una función que depende de los eigenvalores de la energía y que además gobierna la dependencia temporal. Dicha función resulta ser la misma que Moshinsky encontró en el estudio del fenómeno que denominó difracción en el tiempo [20, 21] y es llamada función  $M$ . El formalismo de estados resonantes es una herramienta teórica que ha permitido analizar explícitamente las contribuciones exponenciales y no-exponenciales del decaimiento a tiempos largos (comparados con el tiempo de vida del sistema) utilizando las propiedades analíticas y desarrollos asintóticos de las funciones  $M$ . Así, por ejemplo, se ha obtenido analíticamente que el comportamiento en el régimen de tiempos largos de  $S(t)$  va como  $t^{-3}$ . Sin embargo, al comparar a la probabilidad de supervivencia,  $S(t)$ , con la probabilidad de no-escape,  $P(t) = \int_0^a |\Psi(r, t)|^2 dr$  [19], se generó una controversia con otros autores respecto al comportamiento asintótico de esta última [22, 23, 24], ya que se encontraron comportamientos diferentes para  $P(t)$ . Esta ambigüedad fue provocada por un término de traslape de las eigenfunciones resonantes,  $u_n(r)$ , en  $P(t)$  que finalmente se resolvió mediante el análisis del comportamiento asintótico de la densidad de corriente,  $J(t)$ , lo cual llevó a la conclusión de que ese término de traslape se anula y por lo tanto  $P(t)$  también se comporta asintóticamente como  $t^{-3}$  [25]. Durante la existencia de la controversia se llegó a cuestionar la validez del formalismo de estados resonantes para describir el comportamiento asintótico de  $P(t)$  [24] y esto ha motivado a realizar un análisis alternativo exacto. El análisis involucra la obtención del comportamiento asintótico de la probabilidad de no-escape,  $P(t)$ , a través de la función de onda expresada en términos de la forma integral de su propagador, al cual se le aplica el método de la fase estacionaria [26]. Una contribución importante de este trabajo de tesis consiste en aplicar este análisis alternativo a un potencial delta de Dirac.

Otra contribución aún más importante del presente trabajo consiste en la extensión del formalismo de García-Calderón para describir el decaimiento en la región externa de potenciales de alcance finito. Esta extensión nos permite conocer el comportamiento de la función de onda en regiones alejadas del potencial. Existen por ejemplo, problemas como el de la ionización atómica causada por el decaimiento nuclear  $\alpha$ , y la radiación de frenado (*bremsstrahlung*) en el decaimiento  $\alpha$  que requieren del conocimiento de la función de onda para valores muy grandes de  $r$  y/o  $t$ , y con esta nueva herramienta podríamos explorar tales problemas. Con base en este nuevo marco teórico, se estudia la evolución temporal de la función de onda dependiente del tiempo,  $\Psi_{ex}(r, t)$ , así como la propagación en la región externa del potencial. En este caso también se realiza el cálculo de la forma asintótica de la función de onda a partir de su propagador, desarrollado mediante el método de la fase estacionaria, pero ahora en términos de la función de Green saliente correspondiente a la región externa. Todas estas nuevas herramientas son utilizadas en el presente trabajo para estudiar diversos aspectos del problema de decaimiento aplicado al modelo del potencial delta de Dirac en tres dimensiones, de intensidad  $\lambda$  y localizado a una distancia  $a$  del origen.

Una vez expuestos los antecedentes y la idea general de la investigación que se pretende realizar en el presente trabajo de tesis, a continuación se presenta la distribución del material por capítulos. En el capítulo 2 se reproduce, por completez, el formalismo de estados resonantes para la región interna del potencial. A partir de este formalismo, se derivan las expresiones analíticas para la función de onda,  $\Psi_{in}(r, t)$ , la probabilidad de supervivencia,  $S(t)$ , y la probabilidad de no-escape,  $P(t)$ . En el capítulo 3 se muestra una aportación importante del presente trabajo al hacer una extensión del formalismo presentado en el capítulo 2 a la región externa del potencial. De esta forma se obtiene una expresión analítica para la función de onda de la región externa,  $\Psi_{ex}(r, t)$ . En el capítulo 4 se manipulan las ecuaciones derivadas en los capítulos 2 y 3 para obtener los comportamientos a tiempos largos de todas ellas. Además, se utiliza el método de la fase estacionaria en la expresión integral del propagador de la función de onda para obtener una expresión para el comportamiento de la función de onda a tiempos largos. Este desarrollo, a su vez, nos permite obtener nuevas expresiones para las cantidades asociadas a la función de onda de la región interna. En el capítulo 5 se desarrolla un ejemplo numérico de la aplicación de las ecuaciones de-

sarrolladas en los capítulos anteriores. El ejemplo consiste en un estado cuántico,  $\Psi(r, 0)$ , confinado inicialmente por un potencial delta de intensidad  $\lambda$  localizado a una distancia  $a$  del origen. En este capítulo se hacen los cálculos tanto para la región interna como para la externa del potencial y se comparan sus desarrollos asintóticos con los obtenidos mediante el método de la fase estacionaria. Finalmente, en el capítulo 6 se presentan las conclusiones, las aportaciones y algunas secuelas interesantes del presente trabajo.

## Capítulo 2

# EL FORMALISMO: DESCRIPCIÓN PARA LA REGIÓN INTERNA

El objetivo del presente trabajo consiste en describir analíticamente el problema de decaimiento cuántico en potenciales radiales de alcance finito. Esto es, nos interesa encontrar expresiones analíticas para la evolución temporal de una función de onda inicialmente confinada en la región interna de ese potencial. Deseamos que esta descripción involucre tanto a la región interna del potencial como a la región externa del mismo.

A la fecha existe un formalismo, desarrollado por García-Calderón [27], que nos ofrece una descripción analítica de dicha evolución en la región interna del potencial. Esto se logra a través de la representación de la función de onda y de cantidades tales como la probabilidad de supervivencia y la probabilidad de no-escape en términos de los estados resonantes del sistema.

Con el fin de que nuestro trabajo sea autocontenido, presentaremos en este capítulo la derivación de tal formalismo. Veremos que la función de onda puede expresarse analíticamente en términos de cantidades simples como las funciones  $M$  y las eigenfunciones y los polos resonantes. Esto ofrece una clara ventaja con respecto a otras derivaciones ya que nos permitirá manipular las expresiones y realizar cálculos precisos de la función de onda y de las cantidades asociadas a ella.

## 2.1 La Función de Onda de la Región Interna

El problema que nos ocupa es el de encontrar una solución de la ecuación de Schrödinger para la parte radial en el problema de decaimiento<sup>1</sup>

$$\left[ -\frac{\partial^2}{\partial r^2} + V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \Psi(r, t) = i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t), \quad (2.1)$$

para un potencial que posee simetría esférica y es de alcance finito, i.e.,  $V(r) = 0$  para  $r > a$ .<sup>2</sup> La función de onda,  $\Psi(r, t)$ , además satisface las condiciones de frontera usuales, es decir, debe anularse en el origen a todo tiempo:  $\Psi(0, t) = 0$  y la función de onda inicial,  $\Psi(r, 0)$ , debe estar contenida en la región interna del potencial:  $\Psi(r > a, 0) = 0$ . Además, por tratarse de un problema de decaimiento, la función de onda debe satisfacer la condición de onda saliente, esto es, que a partir de  $r = a_+$ , la función de onda debe estar representada por una función que se aleja del origen.

Sólo abordaremos el problema de decaimiento de ondas  $S$  ( $l = 0$ ) (aunque es posible hacerlo para los casos  $l \neq 0$ ) por lo que la ecuación a resolver se reduce a

$$\left[ -\frac{\partial^2}{\partial r^2} + V(r) \right] \Psi(r, t) = i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t). \quad (2.2)$$

### 2.1.1 La función de onda en términos de la función de Green

Utilizando la noción de propagador, la solución de la ecuación (2.2) se relaciona con su condición inicial como

$$\Psi(r, t) = \int_0^a \Psi(r', 0) g(r, r'; t) dr', \quad (2.3)$$

donde el propagador  $g(r, r'; t)$  es la función de Green dependiente del tiempo, la cual satisface la siguiente ecuación

$$\left[ -\frac{\partial^2}{\partial r^2} + V(r) \right] g(r, r'; t) = i \frac{\partial}{\partial t} g(r, r'; t), \quad (2.4)$$

con las condiciones de frontera equivalentes, esto es,

$$g(0, r'; t) = 0, \quad (2.5)$$

$$g(r, r'; 0) = \delta(r' - r). \quad (2.6)$$

<sup>1</sup>A lo largo de todo el trabajo haremos uso de unidades  $\hbar = 2m = 1$ .

<sup>2</sup> $a$  es el alcance del potencial y el parámetro que separa a la región interna de la externa.

### 2.1.2 La función de Green saliente

El método desarrollado por García-Calderón consiste en desarrollar a la función de Green  $g(r, r'; t)$  en términos de una base tal que permita separar en forma natural, la dependencia temporal de la espacial de la función de onda asociada. Para lograr esto, calculamos la transformada de Laplace de esta función de Green, denotándola por  $\bar{g}(r, r'; s)$ ,

$$\bar{g}(r, r'; s) = \int_0^\infty g(r, r'; t) e^{-st} dt. \quad (2.7)$$

Para simplificar el análisis, resulta conveniente introducir una nueva variable,  $k$ , dada por

$$k = (is)^{1/2}, \quad (2.8)$$

lo que nos permite definir a la función de Green saliente  $G^+(r, r'; k)$ , usada normalmente en la literatura [28], como

$$G^+(r, r'; k) = i \bar{g}(r, r'; s). \quad (2.9)$$

Aplicando la transformada a ambos lados de la ecuación (2.4), obtenemos

$$-\frac{\partial^2}{\partial r^2} \int_0^\infty g(r, r'; t) e^{-st} dt + V(r) \bar{g}(r, r'; s) = i \int_0^\infty \frac{\partial g(r, r'; t)}{\partial t} e^{-st} dt, \quad (2.10)$$

y, utilizando las propiedades de la transformada de Laplace para la derivada y para la condición inicial (2.6), llegamos a

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + is - V(r) \right] i \bar{g}(r, r'; s) = \delta(r - r'), \quad (2.11)$$

o bien,

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + k^2 - V(r) \right] G^+(r, r'; k) = \delta(r - r'). \quad (2.12)$$

Además,  $G^+(r, r'; k)$  debe satisfacer las condiciones de frontera siguientes:

$$G^+(0, r'; k) = 0, \quad (2.13)$$

y

$$\left[ \frac{\partial}{\partial r} G^+(r, r'; k) \right]_{r=a_+} = [ikG^+(r, r'; k)]_{r=a_+}, \quad r' \leq a, \quad (2.14)$$

condiciones que provienen de que la función de onda debe anularse en el origen a todo tiempo y de la condición de onda saliente.

Así, nuestro problema original ha sido transformado en otro equivalente, donde debemos encontrar la función de Green saliente tal que satisfaga la ecuación (2.12) junto con las condiciones de frontera (2.13) y (2.14). Para tal efecto, en la siguiente subsección, utilizaremos herramientas de variable compleja para escribir a  $G^+(r, r'; k)$  como un desarrollo en términos de sus polos complejos y los correspondientes residuos.

Una vez encontrada la forma explícita de la función de Green saliente,  $G^+(r, r'; k)$ , podremos calcular a la función de Green,  $g(r, r'; t)$ , a través de la transformada inversa de Laplace de la ecuación (2.9).

### 2.1.3 Obtención de la función de Green saliente: desarrollo en estados resonantes

En esta subsección expresaremos a la función de Green saliente a través de un desarrollo tipo Mittag-Leffler para escribirla en términos de sus polos y residuos. Encontraremos que los residuos están asociados a los llamados estados resonantes del problema. Así mismo, se discutirá la normalización de dichos estados, los cuales tienen la peculiaridad de estar asociados a energías complejas, representando así procesos de decaimiento.

Regresemos nuestra atención a la ecuación (2.12) y notemos que, para  $r \neq r'$ ,  $G^+(r, r'; k)$  satisface una ecuación diferencial ordinaria homogénea, es decir, satisface la ecuación de Schrödinger del problema. Es bien conocido que  $G^+(r, r'; k)$  puede ser escrita como [28],

$$G^+(r, r'; k) = -\frac{\phi(k, r_{<}) f(k, r_{>})}{W(k)}, \quad (2.15)$$

donde  $r_{<}$  indica el menor entre  $r$  y  $r'$ , y  $r_{>}$  el mayor. La función  $\phi(k, r_{<})$  representa a la solución regular de la ecuación de Schrödinger del problema con condiciones de frontera en el origen de la forma

$$\phi(k, 0) = 0; \quad \left[ \frac{\partial \phi(k, r)}{\partial r} \right]_{r=0} = 1; \quad (2.16)$$

la función  $f(k, r)$  es irregular en el origen y está definida por la condición de que para  $r > a$  (que es a partir de donde el potencial se anula), se comporte como  $\exp(ikr)$ , es decir, como una onda saliente, lo que implica que para  $r = a$  satisface

$$f(k, a) = e^{ika}; \quad \left[ \frac{\partial f(k, r)}{\partial r} \right]_{r=a} = ike^{ika}, \quad (2.17)$$

lo cual la define completamente. La función  $W(k)$  representa al Wronskiano de  $f(k, r)$  y  $\phi(k, r)$ :

$$W(k) = \phi(k, r) \frac{\partial f(k, r)}{\partial r} - f(k, r) \frac{\partial \phi(k, r)}{\partial r}. \quad (2.18)$$

Para una interacción de alcance finito, la función de onda saliente  $G^+(r, r'; k)$ , como función de  $k$ , puede ser extendida analíticamente a todo el plano  $k$  complejo, donde tiene un número infinito de polos que están distribuidos en una forma bien conocida [28, 29] y que surgen de los ceros del Wronskiano (2.18). Además de los polos ligados y antiligados<sup>3</sup>, existen los polos resonantes o puramente complejos, los cuales se distribuyen solamente en la mitad inferior del plano  $k$ . A cada polo complejo  $k_n = a_n - ib_n$ , con  $a_n, b_n > 0$ , le corresponde, debido a la invariancia ante inversión temporal, un polo complejo  $k_{-n}$  situado simétricamente con respecto al eje imaginario, es decir,  $k_{-n} = -k_n^*$ . En el ejemplo que discutiremos en el capítulo 5, utilizaremos un potencial sin parte atractiva, por lo que no habrán estados ligados, y, por lo tanto, todos los polos de  $G^-(r, r'; k)$  se encontrarán en la mitad inferior del plano  $k$  complejo. Es por esto que nuestro análisis se restringe a estados resonantes.

Como se muestra a continuación, los polos complejos de la función de Green saliente están relacionados a los estados resonantes del sistema. Los estados resonantes pueden ser definidos como las soluciones de la ecuación de Schrödinger del problema [5, 30, 31],

$$\frac{d^2 u_n(r)}{dr^2} + [k_n^2 - V(r)] u_n(r) = 0, \quad (2.19)$$

que obedecen las usuales condiciones de frontera en el origen,

$$u_n(0) = 0, \quad (2.20)$$

y que a distancias  $r \geq a$ , describen una situación donde no hay partículas incidentes, es decir,  $u_n(r) \propto \exp(ik_n r)$ , y por lo tanto, satisfacen la condición de onda saliente

$$\left[ \frac{du_n(r)}{dr} \right]_{r=a_+} = ik_n u_n(a). \quad (2.21)$$

Gamow [5] demostró que la condición de onda saliente (2.21) implica que los eigenvalores de la energía del problema son necesariamente complejos, es decir,  $k_n^2 = E_n = \varepsilon_n - i\Gamma_n/2$ ,

<sup>3</sup>Los polos puramente imaginarios localizados en la mitad superior del plano  $k$  corresponden a los estados ligados del problema, mientras que los polos puramente imaginarios localizados en la mitad inferior corresponden a los estados antiligados.

donde  $\varepsilon_n$  representa a la posición de la resonancia y  $\Gamma_n$  se refiere a su correspondiente anchura<sup>4</sup>. Los eigenvalores complejos mencionados corresponden precisamente a los polos complejos de la función de Green saliente del problema. Más aún, resulta que los estados resonantes pueden también ser definidos como los residuos en los polos complejos  $k_n$  de  $G^+(r, r'; k)$  [32]. Aquí seguimos a García-Calderón [18] para escribir

$$R(r, r'; k_n) = \lim_{k \rightarrow k_n} [(k - k_n) G^+(r, r'; k)] = \frac{u_n(r) u_n(r')}{2k_n}, \quad (2.22)$$

suponiendo que los estados resonantes se normalizan como

$$\int_0^a u_n^2(r) dr + \frac{i}{2k_n} u_n^2(a) = 1. \quad (2.23)$$

Estas dos últimas expresiones nos permiten, por un lado, relacionar a los polos y residuos de la función de Green saliente con los estados resonantes,  $u_n$ , y los polos resonantes,  $k_n$ , y por otro, definir la normalización de estos estados resonantes.

Consideremos ahora la integral [18]

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{C'} \frac{G^+(r, r'; z)}{z - k} dz = 0, \quad (2.24)$$

que es tomada a lo largo del contorno  $C'$  de la Figura 2.1, que consiste de un círculo grande, cuyo radio eventualmente irá a infinito, y círculos pequeños que rodean a todos los polos de  $G^+(r, r'; z)$  en el plano  $z$  así como el punto donde  $z = k$ . Como el integrando es analítico dentro de este contorno, la integral se anula, como está indicado en el lado derecho de la ecuación (2.24). Para el círculo grande, se puede probar que la función de Green saliente tiende a cero exponencialmente en todas las direcciones del plano complejo  $z$  [33], esto es,

$$G^+(r, r'; z) \rightarrow 0 \quad \text{cuando} \quad |z| \rightarrow \infty, \quad r_< < r_> \leq a \quad (2.25)$$

Por lo tanto, no hay contribución del círculo grande en la Figura 2.1 y, considerando las contribuciones de todos los círculos pequeños, incluyendo el que está alrededor de  $z = k$ , uno obtiene [18, 34, 35, 36, 37]

$$G_{in}^+(r, r'; k) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{u_n(r) u_n(r')}{2k_n (k - k_n)}; \quad (2.26)$$

<sup>4</sup>Las condiciones de frontera anteriores también proveen la soluciones ligadas y antiligadas correspondiendo respectivamente, a valores imaginarios positivos,  $k_n = i\gamma_n$ , e imaginarios negativos,  $k_n = i\delta_n$ , donde ambos,  $\gamma_n$  y  $\delta_n$  son reales.

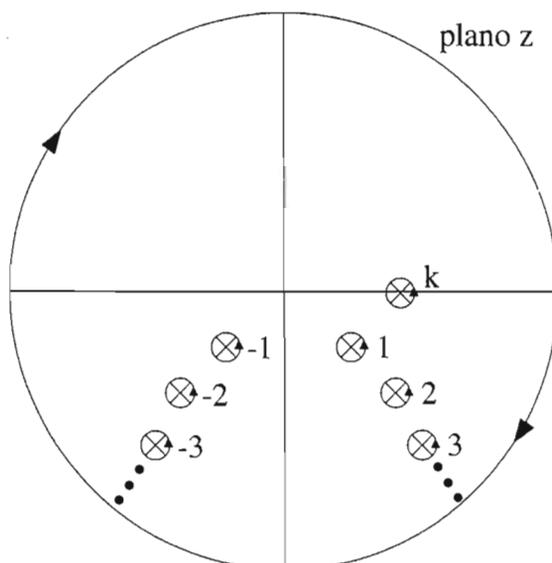


FIGURA 2.1 El contorno  $C'$  en el plano  $z$  para la integral dada por la ecuación (2.24). Los círculos pequeños rodean a todos los polos de  $G^+(r, r'; z)$  así como a  $z = k$ .

donde hemos agregado el subíndice  $in$  para indicar que esta función es sólo válida para la región interna del potencial, es decir, para  $(r, r') < a$ . Sustituyendo la ecuación (2.26) en la ecuación (2.12) obtenemos, después de algunas manipulaciones algebraicas, las reglas de suma [18, 37]

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{u_n(r) u_n(r')}{k_n} = 0; \quad r < r' \leq a, \quad (2.27)$$

y

$$\frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_n(r) u_n(r') = \delta(r - r'); \quad r < r' \leq a. \quad (2.28)$$

Las ecuaciones (2.27) y (2.28) han sido también derivadas siguiendo un desarrollo de  $G_{in}^+(r, r'; k)$  en términos de potencias inversas de  $k$  [34, 35].

Podemos reescribir a la ecuación (2.26) notando que

$$\frac{1}{2k_n(k - k_n)} = \frac{1}{2k} \left[ \frac{1}{k - k_n} + \frac{1}{k_n} \right], \quad (2.29)$$

lo cual nos permite utilizar la regla de suma (2.27), y expresar a  $G_{in}^+(r, r'; k)$  como

$$G_{in}^+(r, r'; k) = \frac{1}{2k} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{u_n(r) u_n(r')}{k - k_n}. \quad (2.30)$$

Hemos así pues determinado la forma explícita de  $G^+(r, r'; k)$  a través de un desarrollo válido para la región interna del potencial. Utilizando este desarrollo encontraremos ahora explícitamente a la función de Green,  $g(r, r'; t)$ , para la región interna.

#### 2.1.4 Determinación de la función de Green

Una vez que hemos determinado a  $G^+(r, r'; k)$  para la región interna, podemos obtener  $g(r, r'; t)$  a través de la transformada inversa de Laplace de la ecuación (2.9), esto es,

$$g(r, r'; t) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} G^+(r, r'; k) e^{st} ds, \quad (2.31)$$

que, en términos de la variable  $k$  (ecuación(2.8)), se transforma en la integral a lo largo del contorno hiperbólico  $C_0$  de la Figura 2.2 [18, 30], es decir,

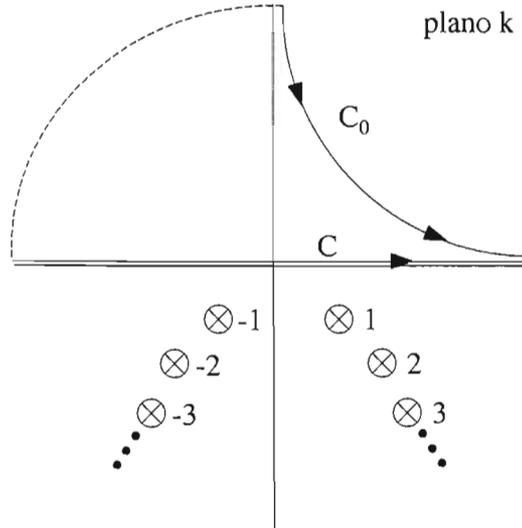
$$g(r, r'; t) = \frac{i}{2\pi} \int_{C_0} G^+(r, r'; k) e^{-ik^2 t} 2k dk. \quad (2.32)$$

Para calcular esta integral, deformaremos el contorno  $C_0$  para explotar las propiedades analíticas de  $G^+(r, r'; k)$  usando el teorema de los residuos. De esta forma podemos obtener expresiones que involucren una suma de términos que decaen exponencialmente más una contribución integral a lo largo de cierta trayectoria del plano  $k$  complejo [30, 38]. Si el potencial se hace cero después de cierta distancia y las cantidades de interés son definidas dentro de la región del potencial, podemos proceder como sigue. Primero deformamos el contorno  $C_0$  al contorno  $C$  como se muestra en la Figura 2.2. Esto puede hacerse fácilmente ya que  $\exp(-ik^2 t)$  converge cuando  $k$  se incrementa en el cuadrante superior izquierdo del plano  $k$ . Como hemos supuesto ausencia de estados ligados, podemos escribir la ecuación (2.32) como

$$g(r, r'; t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G^+(r, r'; k) e^{-ik^2 t} 2k dk. \quad (2.33)$$

Podemos entonces sustituir a la ecuación (2.30) en la ecuación (2.33) para obtener un desarrollo de  $g(r, r'; t)$  en términos de los estados resonantes del problema. La única integral que necesitamos determinar es

$$\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ik^2 t}}{k - k_n} dk. \quad (2.34)$$



**FIGURA 2.2** El contorno  $C_0$  en el plano  $k$  para la integral dada por la ecuación (2.32), el cual puede ser modificado hacia el eje real  $C$  gracias al factor  $e^{-ik^2 t}$ , el cual fuerza a la integral a anularse en la porción del círculo indicada por la línea punteada. También se indican los polos complejos de la función de Green de la ecuación (2.15).

Para evaluar la integral anterior, es importante mencionar que existe un tipo de integral que ha sido discutido por Moshinsky [21, 20] la cual aparece en la descripción de efectos transitorios en problemas dependientes del tiempo en Mecánica Cuántica [18, 19, 39, 40] y puede ser denotada como

$$M(x, q, t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ik^2 t} e^{ikx}}{k - q} dk = \frac{1}{2} e^{ix^2/4t} w(iy_q), \quad (2.35)$$

donde

$$y_q = \frac{x - 2qt}{2t^{1/2}} e^{-i\pi/4}, \quad (2.36)$$

y la función  $w(iy_q)$  está definida en términos de la función de error complementaria [41]

$$w(z) = e^{-z^2} \operatorname{erfc}(-iz). \quad (2.37)$$

En nuestro caso, es claro que la integral (2.34) corresponde a la función de Moshinsky,  $M(0, k_n, t)$ , o, abreviadamente,  $M(k_n, t)$ .

Así, la función de Green dependiente del tiempo para la región interna,  $g_{in}(r, r'; t)$ , toma la forma [18],

$$g_{in}(r, r'; t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_n(r) u_n(r') M(k_n, t), \quad r < r' \leq a. \quad (2.38)$$

Habiendo obtenido a la función de Green para la región interna, en la siguiente subsección procederemos a la determinación de  $\Psi_{in}(r, t)$  para una condición inicial arbitraria,  $\Psi(r, 0)$ .

### 2.1.5 Determinación de la función de onda

Recordemos que si nuestro estado inicial es  $\Psi(r, 0)$ , al tiempo  $t$ ,  $\Psi(r, t)$  está dada por la integral

$$\Psi(r, t) = \int_0^a \Psi(r', 0) g(r, r'; t) dr'. \quad (2.39)$$

Sustituyendo la forma explícita de la función de Green recientemente encontrada, podemos escribir a la función de onda de la región interna como

$$\Psi_{in}(r, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n u_n(r) M(k_n, t); \quad r < a, \quad (2.40)$$

donde el coeficiente  $C_n$  se define como

$$C_n = \int_0^a \Psi(r, 0) u_n(r) dr. \quad (2.41)$$

La eigenfunción,  $u_n(r)$ , está normalizada de acuerdo con la ecuación (2.23) y la función de onda inicial,  $\Psi(r, 0)$ , de la forma usual como

$$\int_0^a |\Psi(r, 0)|^2 dr = 1. \quad (2.42)$$

Notemos que la expresión (2.40) para la función de onda tiene la peculiaridad de que el comportamiento en  $r$  está separado del comportamiento en  $t$ . Esto nos facilita el estudio de la misma, ya que se pueden analizar sus propiedades temporales y espaciales por separado. En forma análoga a como se definió al coeficiente  $C_n$ , definimos al coeficiente  $\bar{C}_n$  como

$$\bar{C}_n = \int_0^a \Psi^*(r, 0) u_n(r) dr. \quad (2.43)$$

Ambos coeficientes,  $C_n$  y  $\bar{C}_n$ , obedecen algunas relaciones útiles: multipliquemos las ecuaciones (2.27) y (2.28), por  $\Psi(r, 0)$  y  $\Psi^*(r, 0)$ , respectivamente, e integremos el resultado desde el origen hasta un radio  $a$  para obtener [18],

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{C_n \bar{C}_n}{k_n} = 0, \quad (2.44)$$

y

$$\frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n \bar{C}_n = 1. \quad (2.45)$$

Por último, al sustituir la ecuación (2.40) en la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, encontramos que también se satisface esta otra regla de suma:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n \bar{C}_n k_n = 0. \quad (2.46)$$

La utilidad de estas relaciones se probará al momento de calcular cantidades tales como las probabilidades de supervivencia y de no-escape. Al realizar los desarrollos asintóticos de las funciones  $M$  involucradas en tales cálculos, encontraremos términos iguales a las relaciones anteriores, especialmente a la de la ecuación (2.44), que podremos sustituir inmediatamente y así deducir de antemano el comportamiento de dichas cantidades.

## 2.2 Las Probabilidades de Supervivencia y de No-Escape

Existen en la literatura dos cantidades asociadas a la función de onda de la región interna que se han propuesto para describir la evolución temporal del decaimiento: (i) la probabilidad de supervivencia,  $S(t)$ , del estado inicial a un tiempo  $t$  después del inicio del proceso y (ii) la probabilidad de no-escape,  $P(t)$ , de encontrar a la partícula todavía confinada al tiempo  $t$ . De las dos nociones, la probabilidad de supervivencia es la que ha sido más utilizada en estudios clásicos de decaimiento [42] particularmente en contribuciones no-exponenciales [11] y también en estudios dinámicos de caos cuántico [43]. Sin embargo, las probabilidades de supervivencia y de no-escape corresponden a dos definiciones y tipos diferentes de fenómenos [44]. Por ejemplo, en ausencia de decaimiento, como en una región cerrada, la probabilidad de no-escape como función del tiempo es siempre la unidad, mientras que la probabilidad de supervivencia en general varía con el tiempo.

Siguiendo con nuestra notación, en donde tenemos al estado inicial,  $\Psi(r, 0)$ , confinado en una región del espacio, la amplitud de supervivencia se define como

$$A(t) = \int_0^a \Psi^*(r, 0) \Psi(r, t) dr, \quad (2.47)$$

y  $S(t) = |A(t)|^2$  es la probabilidad de encontrar al estado  $\Psi(r, t)$  en su valor inicial  $\Psi(r, 0)$ . Por otro lado, la probabilidad de que la partícula, descrita inicialmente por una función de onda inicial confinada en la región de interacción del potencial,  $\Psi(r, 0)$ , no haya escapado fuera del potencial al tiempo  $t$  está definida por

$$P(t) = \int_0^a \Psi^*(r, t) \Psi(r, t) dr; \quad (2.48)$$

la normalización del estado inicial implica que  $S(0) = P(0) = 1$ .

Debido a los límites que involucran las integrales, es claro que sólo necesitamos conocer a la función de onda en la región interna del potencial para describir completamente a ambas probabilidades. Sustituyendo la ecuación (2.40) en la ecuación (2.47) obtenemos

$$A(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n \bar{C}_n M(k_n, t), \quad (2.49)$$

por lo que, dado que  $S(t) = |A(t)|^2$ , obtenemos

$$S(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} C_n \bar{C}_n C_l^* \bar{C}_l^* M(k_n, t) M^*(k_l, t). \quad (2.50)$$

Similarmente, la probabilidad de no-escape, por sustitución de la ecuación (2.40) en la ecuación (2.48), se lee

$$P(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} C_n C_l^* I_{nl} M(k_n, t) M^*(k_l, t), \quad (2.51)$$

donde  $I_{nl}$  está definida por

$$I_{nl} = \int_0^a u_l^*(r) u_n(r) dr. \quad (2.52)$$

Notemos que  $S(t)$  y  $P(t)$  son muy similares pues poseen la misma dependencia en las funciones  $M$ . Las integrales  $I_{nl}$  que aparecen en  $P(t)$  reemplazan al producto de los coeficientes  $\bar{C}_n \bar{C}_l^*$  que aparecen en  $S(t)$ .

Reproduciendo el formalismo de García-Calderón hemos desarrollado expresiones analíticas para la función de onda en la región interna y para sus cantidades asociadas (ecuaciones (2.40), (2.50) y (2.51)), encontrando en el camino algunas relaciones útiles (ecuaciones (2.44) y (2.45)).

## Capítulo 3

# EXTENSIÓN DEL FORMALISMO A LA REGIÓN EXTERNA

A través de los años, el estudio de la evolución temporal de la función de onda en el problema de decaimiento se ha centrado en la región interna del potencial [12, 13, 18, 19, 45]. De hecho, en la mayoría de los estudios se aborda el problema de la ley exponencial de decaimiento y de su desviación a tiempos cortos y largos con respecto a la vida media del sistema. Para tales análisis basta con conocer a la función de onda,  $\Psi(r, t)$ , dentro de la región de interacción. Sin embargo, si deseamos estudiar una situación física, en donde la partícula se escapa del sistema para interactuar con el medio circundante, es necesario contar con herramientas que nos permitan explorar a la función de onda en todo el espacio.

En nuestro intento por realizar tal descripción en forma analítica, presentaremos en este capítulo una de las principales aportaciones de nuestro trabajo: el desarrollo de la función de onda en la región externa del potencial. El contar con una expresión analítica representa una ventaja con respecto a los enfoques basados en la solución numérica de la ecuación de Schrödinger, en donde el cálculo de las cantidades físicas en ciertos regímenes de interés ( $r$  y  $t$  grandes) se vuelve computacionalmente prohibitivo [14].

En la siguiente sección, nos concentraremos en el desarrollo de una expresión analítica para la función de onda de la región externa del potencial siguiendo un procedimiento similar al del capítulo anterior. Mediante una manipulación conveniente, veremos que podemos aprovechar nuestro conocimiento adquirido en la derivación de la región interna y así obtener más fácilmente la expresión para la función de onda de la región externa.

Encontraremos que dicha función es descrita, al igual que en la región interna, en términos de los estados resonantes del problema. Nuevamente, al poder expresar a la función de onda en términos de cantidades simples tales como las funciones  $M$ , las eigenfunciones resonantes y los polos resonantes, podremos manipularla y efectuar así cálculos

precisos de la misma.

### 3.1 La Función de Onda de la Región Externa

En forma análoga a como se hizo en el capítulo anterior, procederemos a derivar a la función de onda de la región externa del potencial. Sin embargo, aprovecharemos nuestro conocimiento de la región interna para expresar a la función de Green saliente de la región externa,  $G_{ex}^+(r, r', k)$ , en términos de la función de Green saliente de la región interna,  $G_{in}^+(r, r', k)$ , y así obtener fácilmente la expresión para la función de Green de la región externa,  $g_{ex}(r, r', t)$ . Una vez obtenida esta última función, es directo calcular la expresión para la función de onda para la región externa.

Iniciaremos nuestra derivación de la función de Green de la región externa a partir de la ecuación (2.33), en donde, en principio, necesitaríamos conocer en forma explícita a la función de Green saliente de esa región ( $G_{ex}^+(r, r'; k)$ ). Sin embargo, este planteamiento no es realmente necesario si hacemos las siguientes manipulaciones: primero, utilicemos la ecuación (2.15), que define a la función de Green saliente para cualquier región y sustituyámosla en la ecuación (2.33), de modo que obtenemos

$$g(r, r'; t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{\phi(k, r') f(k, r)}{W(k)} e^{-ik^2 t} 2k dk, \quad (3.1)$$

en donde hemos supuesto que  $r' < r$ . Ahora, multipliquemos por la unidad, expresada como el producto de las exponenciales  $e^{\pm ika}$  y reacomodemos términos para obtener

$$g(r, r'; t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left( -\frac{\phi(k, r') e^{ika}}{W(k)} \right) f(k, r) e^{-ika} e^{-ik^2 t} 2k dk. \quad (3.2)$$

Esta manipulación nos permite identificar en la ecuación anterior que la expresión entre paréntesis corresponde a la función de Green saliente  $G_{in}^+(r, r'; k)$  evaluada en  $r = a$  (ver la ecuación (2.15) y la primera de las ecuaciones (2.17)); además, haciendo  $r \geq a$ , de modo que, por definición,  $f(k, r > a) = e^{ikr}$  obtenemos

$$g(r, r'; t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_{in}^+(a, r'; k) e^{ik(r-a)} e^{-ik^2 t} 2k dk. \quad (3.3)$$

De esta forma podemos identificar en la ecuación anterior a la función de Green saliente para la región externa del potencial como

$$G_{ex}^+(r, r'; k) = G_{in}^+(a, r'; k) e^{ik(r-a)}. \quad (3.4)$$

en donde, por construcción,  $r' \leq a$  y  $r \geq a$ .

Sustituyendo (2.30) en (3.3) tendremos ahora que evaluar la integral

$$\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ik(r-a)} e^{-ik^2 t}}{k - k_n} dk, \quad (3.5)$$

la cual corresponde a la función  $M(r - a, k_n, t)$ . Finalmente, podemos escribir la siguiente ecuación

$$g_{ex}(r, r'; t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_n(r') u_n(a) M(r - a, k_n, t); \quad r' \leq a, \quad r \geq a. \quad (3.6)$$

Así, hemos encontrado una expresión para la función de Green en donde una de las variables ( $r$ ) puede ser evaluada para valores mayores a  $a$ .

Al igual que en la región interna, si nuestro estado inicial es  $\Psi(r, 0)$ , podemos calcular a la función de onda de la región externa al tiempo  $t$  a través de la integral

$$\Psi_{ex}(r, t) = \int_0^a \Psi(r', 0) g_{ex}(r, r'; t) dr', \quad (3.7)$$

para obtener

$$\Psi_{ex}(r, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n u_n(a) M(r - a, k_n, t); \quad r \geq a, \quad (3.8)$$

donde el coeficiente  $C_n$  está definido por la primera de las ecuaciones (2.41).

Esta última ecuación para la función de onda de la región externa difiere de la de la región interna (2.40) en el sentido de que aquí están mezcladas las dependencias temporal y espacial en la función  $M$ . Esto tendrá como consecuencia que al analizar las propiedades en los límites de tiempos largos necesariamente se establezcan también propiedades para la dependencia espacial.

En este momento tenemos a nuestra disposición las expresiones para describir la evolución temporal de la función de onda en cualquier región del espacio <sup>1</sup>:

$$\Psi(r, t) = \begin{cases} \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n u_n(r) M(k_n, t) & r \leq a \\ \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n u_n(a) M(r - a, k_n, t) & r \geq a. \end{cases} \quad (3.9)$$

Con estas herramientas matemáticas, en el siguiente capítulo, estudiaremos el comportamiento a tiempos largos de la función de onda y de sus cantidades asociadas.

<sup>1</sup>Notemos que se puede verificar inmediatamente la condición de que ambas expresiones son iguales para  $r = a$ .

## Capítulo 4

### DESARROLLOS A TIEMPOS LARGOS

En su trabajo pionero de 1957, Khalfin planteó la existencia de contribuciones no-exponenciales al decaimiento cuántico [11, 46]. Demostró que, debido a que los posibles valores de la energía en un sistema están acotados por abajo, es decir, debido a que pueden ir de un valor mínimo (el estado base) a infinito, deben de existir desviaciones del comportamiento exponencial en el decaimiento a tiempos cortos y largos con respecto a la vida media del sistema en cuestión. A partir de ese momento se despertó un gran interés por definir este comportamiento tanto en el contexto teórico [13, 38, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54] como en el experimental [15, 16, 17, 55, 56]. En la literatura podemos encontrar algunos estudios enfocados en la descripción del régimen de tiempos largos de las cantidades asociadas a la función de onda de la región interna [18, 57].

En la sección (4.1) del presente capítulo, desarrollaremos las expresiones para el comportamiento a tiempos largos de la función de onda de la región interna del potencial y de sus cantidades asociadas. Posteriormente, en la sección (4.2), desarrollaremos una nueva expresión para la función de onda de la región externa. Por último, mediante el uso del método de la fase estacionaria, que nos permite evaluar la contribución principal de cierto tipo de integrales, desarrollaremos en la sección (4.3) una nueva expresión para el comportamiento de la función de onda a tiempos largos, válida tanto para la región interna como para la externa del potencial. Esta expresión nos servirá para verificar nuestros resultados.

## 4.1 La Región Interna

A continuación derivaremos una expresión para tiempos largos para la función de onda de la región interna del potencial. Para lograrlo, haremos uso de desarrollos asintóticos de las funciones  $M(y_q)$  involucradas en la descripción de dicha función. De este modo, encontraremos el tipo de desviaciones del comportamiento exponencial que experimentan la función de onda y sus cantidades asociadas a tiempos largos como fue previsto por Khalfin. Aunque este tipo de desarrollos ya fueron reportados en la literatura [18, 57], por completez los incluimos aquí.

Tomemos como punto de partida la expresión para la función de onda de la región interna (ver ecuación (3.9)):

$$\Psi_{in}(r, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n u_n(r) M(k_n, t), \quad r \leq a, \quad (4.1)$$

en donde el coeficiente  $C_n$  está dado por la ecuación (2.41). Como podemos ver, la ecuación (4.1) involucra una suma en donde se utilizan todos los polos resonantes del sistema, es decir, tanto los polos del tercer cuadrante,  $k_{-n}$ , como los del cuarto,  $k_n$ . Sin embargo, podemos expresar la misma ecuación como función sólo de los polos del cuarto cuadrante utilizando la relación que existe entre ambos subconjuntos de polos debido a la invariancia ante inversión temporal, *i.e.*,  $k_{-n} = -k_n^*$ . Así, la ecuación anterior se puede reescribir como

$$\begin{aligned} \Psi_{in}(r, t) &= \sum_{m=1}^{\infty} C_m u_m(r) M(k_m, t) + \sum_{m=-1}^{-\infty} C_m u_m(r) M(k_m, t), \quad r \leq a, \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} [C_m u_m(r) M(k_m, t) + C_{-m} u_{-m}(r) M(k_{-m}, t)], \quad r \leq a, \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} [C_m u_m(r) M(k_m, t) + C_m^* u_m^*(r) M(-k_m^*, t)], \quad r \leq a, \end{aligned} \quad (4.2)$$

en donde hemos utilizado las relaciones  $C_{-m} = C_m^*$  y  $u_{-m}(r) = u_m^*(r)$  que se obtienen también de la invariancia ante inversión temporal.

Notemos que el comportamiento en el tiempo de la función de onda (4.2) está definido enteramente por las funciones  $M(y_q)$  involucradas, por lo que, para describir el régimen de tiempos largos, necesitaremos algún desarrollo asintótico de estas últimas. En el apéndice A obtenemos este desarrollo para  $M(x, q, t)$ , tanto para  $x = 0$  como para  $x \neq 0$  a partir de

la conexión que existe entre las funciones  $M(y_q)$  y la de error complementaria,  $\operatorname{erfc}(y_q)$  (ver ecuaciones (2.35) y (2.37)).

Utilizaremos el desarrollo asintótico para  $M(x=0, q, t) = M(q, t)$  (ecuación (A.8)) que establece que, para  $|q|t^{1/2} \gg 1$  y  $\frac{\pi}{2} < \arg q < 2\pi$ ,

$$M(q, t) = -i\alpha \left[ \left( \frac{1}{qt^{1/2}} \right) + \sum_{m=1}^{\infty} (-i)^m \left( \frac{1 \cdot 3 \cdot \dots \cdot (2m-1)}{2^m} \right) \left( \frac{1}{q^{2m+1} t^{m+1/2}} \right) \right], \quad (4.3)$$

donde la constante  $\alpha$  está definida por

$$\alpha \equiv \frac{e^{-i\pi/4}}{2\sqrt{\pi}}. \quad (4.4)$$

Además, utilizaremos la siguiente identidad (ecuación (7.1.11) de la referencia [41]):

$$w(y) = 2e^{-y^2} - w(-y), \quad (4.5)$$

que, para las funciones  $M$ , se vuelve

$$M(x, q, t) = e^{ixq} e^{-iq^2 t} - M(-x, -q, t), \quad (4.6)$$

en donde hemos utilizado la definición usual de  $y = \frac{x-2qt}{2t^{1/2}} e^{-i\pi/4}$ . En particular, para la región interna, en donde  $x=0$  y  $y = -qt^{1/2} e^{-i\pi/4}$ , la ecuación (4.6) se vuelve

$$M(q, t) = e^{-iq^2 t} - M(-q, t). \quad (4.7)$$

Observando la condición para el argumento de  $q$  ( $\frac{\pi}{2} < \arg q < 2\pi$ ) para utilizar el desarrollo (4.3) y, dado que tanto los polos  $k_n$  del cuarto cuadrante, como sus negativos,  $-k_n$ , satisfacen dicha condición, podemos utilizar la identidad (4.7) en la primera de las funciones  $M$  de la ecuación (4.2) para escribir a la función de onda como

$$\begin{aligned} \Psi_{in}(r, t) &= \sum_{m=1}^{\infty} C_m u_m(r) e^{-ik_m^2 t} - \sum_{m=1}^{\infty} C_m u_m(r) M(-k_m, t) \\ &+ \sum_{m=1}^{\infty} C_m^* u_m^*(r) M(-k_m^*, t), \quad r \leq a, \end{aligned} \quad (4.8)$$

y entonces aplicar el desarrollo (4.3). Antes de hacerlo hay dos aspectos que destacar con respecto a esta última ecuación: el primero es que se trata de una expresión completa en el sentido de que nos permite calcular a la función de onda de la región interna a cualquier

tiempo,  $t$ . El segundo aspecto consiste en que logramos extraer y escribir explícitamente el término que corresponde a la contribución exponencial. Esto implica que las desviaciones del comportamiento exponencial, ya sean a tiempos cortos o largos, estarán dadas exclusivamente por los desarrollos asintóticos correspondientes de las funciones  $M$ .

Utilizando el desarrollo (4.3) en la ecuación (4.1) podemos obtener las contribuciones no-exponenciales a la función de onda de la región interna a tiempos largos que, a hasta orden  $t^{-3/2}$  van como

$$\Psi_{in}(r, t) = 2\alpha \operatorname{Im} \left[ \sum_{m=1}^{\infty} \frac{C_m u_m(r)}{k_m} \right] \left( \frac{1}{t^{1/2}} \right) - i\alpha \operatorname{Im} \left[ \sum_{m=1}^{\infty} \frac{C_m u_m(r)}{k_m^3} \right] \left( \frac{1}{t^{3/2}} \right), \quad r \leq a. \quad (4.9)$$

La ecuación anterior puede simplificarse con la ayuda de la regla de suma señalada en la ecuación (2.27), a partir de la cual, puede demostrarse que el término  $\operatorname{Im} \left[ \sum_{m=1}^{\infty} \frac{C_m u_m(r)}{k_m} \right] = 0$ , de modo que la potencia  $t^{1/2}$  no contribuye al valor de  $\Psi_{in}(r, t)$  y así, el primer término relevante será el de  $t^{-3/2}$ . Por lo tanto, a segundo orden, podemos decir que la función de onda de la región interna a tiempos largos se comporta como

$$\Psi_{in}(r, t) = -i\alpha \operatorname{Im} \left[ \sum_{m=1}^{\infty} \frac{C_m u_m(r)}{k_m^3} \right] \left( \frac{1}{t^{3/2}} \right), \quad r \leq a. \quad (4.10)$$

Utilizando este último desarrollo podemos obtener las expresiones a tiempos largos de las funciones asociadas a la función de onda de la región interna, es decir, de las probabilidades de supervivencia,  $S(t)$ , y de no-escape,  $P(t)$ , ecuaciones (2.50) y (2.51), respectivamente.

A segundo orden, estas cantidades se comportan como

$$S(t) = |\alpha|^2 \operatorname{Im} \left[ \sum_{m=1}^{\infty} \frac{C_m^2}{k_m^3} \right] \left( \frac{1}{t^3} \right) \quad (4.11)$$

y

$$P(t) = \frac{|\alpha|^2}{2} \operatorname{Re} \left[ \sum_{m,s=1}^{\infty} \left( \frac{C_m C_s^*}{k_m^3 k_s^{*3}} I_{ms} - \frac{C_m^* C_s}{k_m^{*3} k_s^3} \bar{I}_{ms} \right) \right] \left( \frac{1}{t^3} \right) \quad (4.12)$$

en donde

$$\begin{aligned} I_{ms} &\equiv \int_0^a u_m(r) u_s^*(r) dr \\ &= \frac{u_m(a) u_s^*(a)}{i(k_m - k_s^*)}, \end{aligned} \quad (4.13)$$

e

$$\bar{I}_{ms} \equiv \int_0^a u_m^*(r) u_s(r) dr$$

$$= \delta_{ms} - \frac{u_m^*(a)u_s^*(a)}{i(k_m^* + k_s^*)}. \quad (4.14)$$

Notemos que ambas probabilidades en el régimen de tiempos largos van como  $t^{-3}$ .

A continuación veremos qué sucede con la función de onda de la región externa del potencial.

## 4.2 La Región Externa

Para conocer el comportamiento a tiempos largos de la función de onda de la región externa del potencial utilizaremos el mismo procedimiento de la sección anterior sólo que aplicado a la ecuación (3.9) para la función de onda para la región externa. Esta ecuación, expresada sólo en términos de los polos del cuarto cuadrante, se escribe como

$$\Psi_{ex}(r, t) = \sum_{m=1}^{\infty} [C_m u_m(a) M(r-a, k_m, t) + C_m^* u_m^*(a) M(r-a, -k_m^*, t)], \quad r \geq a. \quad (4.15)$$

Una vez más utilizaremos el desarrollo asintótico de la función  $M(y_q)$  pero esta vez para  $x \neq 0$  (ecuación (A.12)) que establece que, para  $\frac{|x|}{2t^{1/2}} \ll 1$ ,  $|q|t^{1/2} \gg 1$  y  $\frac{\pi}{2} < \arg q < 2\pi$ ,

$$M(x, q, t) = -i\alpha \left[ \left( \frac{1}{qt^{1/2}} \right) + \left( \frac{ix^2 q^2 + 2xq - 2i}{4q^3} \right) \left( \frac{1}{t^{3/2}} \right) + \dots \right], \quad (4.16)$$

donde la constante  $\alpha$  está definida por la ecuación (4.4).

Nuevamente, observando la condición para el argumento de  $q$  ( $\frac{\pi}{2} < \arg q < 2\pi$ ) y, dado que tanto los polos  $k_n$  del cuarto cuadrante, como sus negativos,  $-k_n$ , también satisfacen dicha condición, podemos utilizar la identidad (4.6):

$$M(x, q, t) = e^{ixq} e^{-iq^2 t} - M(-x, -q, t)$$

en la primera de las funciones  $M$  de la ecuación (4.15) para escribir a la función de onda como

$$\begin{aligned} \Psi_{ex}(r, t) &= \sum_{m=1}^{\infty} C_m u_m(a) e^{i(r-a)k_m} e^{-ik_m^2 t} - \sum_{m=1}^{\infty} C_m u_m(a) M(a-r, -k_m, t) \\ &+ \sum_{m=1}^{\infty} C_m^* u_m^*(a) M(r-a, -k_m^*, t), \quad r \geq a, \end{aligned} \quad (4.17)$$

y entonces aplicar el desarrollo (4.16). Ahora tenemos una expresión completa para la función de onda en la región externa en el sentido de que es válida para cualquier tiempo,  $t$ .

Además, como hemos separado en forma explícita a la parte exponencial, las desviaciones a tiempos largos y cortos otra vez estarán dadas por los desarrollos asintóticos correspondientes de las funciones  $M$  involucradas.

Utilizando el desarrollo (4.16) en la ecuación (4.17) podemos obtener las contribuciones no-exponenciales a la función de onda de la región externa a tiempos largos que, a segundo orden van como<sup>1</sup>

$$\Psi_{ex}(r, t) = -i\alpha \left[ (r - a) \operatorname{Re} \left( \sum_{m=1}^{\infty} \frac{C_m u_m(a)}{k_m^2} \right) + \operatorname{Im} \left( \sum_{m=1}^{\infty} \frac{C_m u_m(a)}{k_m^3} \right) \right] \left( \frac{1}{t^{3/2}} \right), \quad r \geq a, \quad (4.18)$$

en donde ya hemos eliminado la contribución que va como  $t^{-1/2}$  ya que nuevamente aparece como coeficiente la suma  $\operatorname{Im} \left[ \sum_{m=1}^{\infty} \frac{C_m u_m(a)}{k_m} \right]$  que, como ya vimos, se anula.

Notemos que si hacemos  $r = a$  en la ecuación anterior obtenemos la misma ecuación que la de la función de onda de la región interna (ecuación (4.10)) evaluada también en  $r = a$ . Además, de las condiciones para poder utilizar el desarrollo asintótico para argumentos grandes, tenemos que se deben satisfacer las siguientes condiciones:  $\left( \frac{r-a}{2t^{1/2}} \ll 1 \right)$ ,  $\left( |k_n| t^{1/2} \gg 1 \right)$ . Esto implica que en el límite de tiempos largos, además, se debe satisfacer que estemos a distancias relativas  $r$ , pequeñas de modo que se satisfaga que  $r - a$  sea siempre mucho menor que  $2t^{1/2}$ .

### 4.3 Método de la Fase Estacionaria para Evaluar a la Función de Onda

A continuación desarrollaremos una nueva expresión para el comportamiento a tiempos largos de la función de onda de las regiones interna y externa del potencial utilizando el método de la fase estacionaria [18]. Este método [58] nos permite obtener, de la expresión integral de la función de onda en términos de la función de Green, el término dominante en el límite de tiempos largos que nos da la mayor contribución al valor de la función de onda. La expresión integral que utilizaremos será la que define a la función de Green del problema, ecuación (2.33):

$$g(r, r'; t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G^+(r, r'; k) e^{-ik^2 t} 2k dk. \quad (4.19)$$

<sup>1</sup>Aunque, tanto para la expresión para la función de onda de la región interna, como para la de la región externa, hicimos los desarrollos hasta segundo orden, debemos tener presente que en ambas regiones es posible desarrollar las expresiones a cualquier orden deseado.

El método consiste en hacer un desarrollo de Taylor de la función de Green saliente alrededor de los puntos silla del integrando<sup>2</sup>, que en este caso corresponden sólo al valor de  $k = 0$ , de modo que la ecuación anterior cambia por

$$g(r, r'; t) = \frac{i}{2\pi} \left[ G^+(r, r'; 0) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik^2 t} 2k dk + \left( \frac{\partial G^+(r, r'; k)}{\partial k} \right) \Big|_{k=0} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik^2 t} 2k^2 dk + \dots \right]. \quad (4.20)$$

La primera de las integrales de la expresión (4.20) se anula ya que el integrando es impar y, realizando el cambio de variable  $ik^2 t = u^2$  en la segunda integral para resolverla, obtenemos

$$g(r, r'; t) = \frac{\sqrt{-i}}{2\pi^{1/2}} \left[ \frac{\partial G^+(r, r'; k)}{\partial k} \right]_{k=0} \frac{1}{t^{3/2}} + O\left(\frac{1}{t^{5/2}}\right). \quad (4.21)$$

de modo que, al calcular la función de onda (ecuación (2.3)), se obtiene que

$$\Psi(r, t) = \alpha \dot{C}(r, 0) \frac{1}{t^{3/2}} + O\left(\frac{1}{t^{5/2}}\right), \quad (4.22)$$

en donde nuevamente aparece la constante  $\alpha$  definida por la ecuación (4.4) y

$$\dot{C}(r, 0) = \int_0^a \Psi(r', 0) \left[ \frac{\partial G^+(r, r'; k)}{\partial k} \right]_{k=0} dr'. \quad (4.23)$$

De aquí podemos concluir que en el límite  $t \gg 1$ , la función de onda tiende al valor

$$\Psi(r, t) = \alpha \dot{C}(r, 0) \frac{1}{t^{3/2}}. \quad (4.24)$$

resultado que, con respecto a la potencia del tiempo, concuerda con el obtenido en las ecuaciones (4.10) y (4.18).

Este resultado es válido tanto para la región interna como para la externa del potencial y para utilizarlo, sólo necesitamos conocer a la función de Green saliente de la región correspondiente para calcular el coeficiente  $\dot{C}(r, 0)$ . Al momento de realizar cálculos con las expresiones encontradas en las primeras dos secciones del presente capítulo para las funciones de onda de las regiones interna y externa del potencial, éstos deben de coincidir con los cálculos realizados con la expresión para la función de onda encontrada en esta sección. De hecho, utilizaremos esta comparación para mostrar que nuestros cálculos son consistentes.

<sup>2</sup>Estos puntos se obtienen a partir de los ceros de la parte imaginaria del coeficiente del parámetro  $t$  en el exponente de la exponencial que aparece en la integral en cuestión, en este caso, de los ceros de  $k^2$ .

## Capítulo 5

# APLICACIÓN DEL FORMALISMO

En este capítulo aplicaremos las herramientas desarrolladas en los capítulos anteriores para describir problemas de decaimiento de ondas S en potenciales de alcance finito y con simetría esférica. Específicamente, el problema que resolveremos es el de un estado cuántico confinado inicialmente (a  $t = 0$ ) por un potencial delta de Dirac localizado a una distancia  $a$  del origen. El estado inicial estará dado por las eigenfunciones de la caja de paredes infinitas definida en el intervalo  $0 \leq r \leq a$ .

A un tiempo  $t > 0$ , el estado escapa de la región de confinamiento y la dinámica puede ser descrita mediante la densidad de probabilidad en la regiones interna ( $r \leq a$ ) y externa ( $r \geq a$ ) del potencial, como funciones del tiempo y de la posición ( $\Psi_{in}(r, t)$  y  $\Psi_{ex}(r, t)$ , respectivamente). Aunque el cálculo de ambas probabilidades puede darnos información importante de la dinámica del sistema, podemos utilizar también otras cantidades físicas asociadas a la función de onda de la región interna,  $\Psi_{in}(r, t)$ , como son la probabilidad de supervivencia,  $S(t)$ , y la probabilidad de no-escape,  $P(t)$ . La primera nos provee información en el tiempo de qué tanto se parece la función de onda,  $\Psi_{in}(r, t)$ , a la función de onda original,  $\Psi(r, 0)$ , mientras que la segunda nos da información en el tiempo sobre qué fracción de la función de onda,  $\Psi_{in}(r, t)$ , se encuentra todavía en la región interna del potencial,  $0 \leq r \leq a$ .

Para el cálculo de todas estas cantidades ( $\Psi_{in}(r, t)$ ,  $S(t)$ ,  $P(t)$  y  $\Psi_{ex}(r, t)$ ), es necesario conocer los polos y las eigenfunciones resonantes,  $k_n$  y  $u_n(r)$  respectivamente, y los coeficientes  $C_n$  y  $\bar{C}_n$  (definidos por las ecuaciones (2.41) y (2.43)) asociados a cada uno de ellos. Los conjuntos de polos y eigenfunciones resonantes se obtienen a partir de la solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con condiciones a la frontera de onda saliente. Este planteamiento nos conduce a una ecuación trascendental para los polos, la cual es resuelta mediante el método de Newton-Raphson [59].

Aunque las expresiones que poseemos describen las soluciones para cualquier tiempo  $t$ , en el ejemplo que resolveremos. nos enfocaremos a aquellos tiempos en donde se observa el decaimiento de tipo exponencial y las desviaciones de éste a tiempos largos, es decir, excluirémos de la descripción las desviaciones del comportamiento exponencial a tiempos cortos. Este último estudio lo dejaremos para un trabajo posterior.

Los resultados de nuestro estudio se presentan en tres secciones. En la sección 5.1 nos dedicamos a la tarea de calcular los polos, las eigenfunciones resonantes y los coeficientes  $C_n$  y  $\bar{C}_n$ . En la sección 5.2 abordamos el problema del decaimiento en la región interna del potencial. Calculamos la función de onda así como las probabilidades de supervivencia y de no-escape y, con la finalidad de que nuestro trabajo sea autocontenido, reproducimos los resultados obtenidos por García-Calderón *et al.* [19], para  $S(t)$  y el cálculo de  $P(t)$ , de acuerdo a los resultados discutidos en la referencia [25]. Además, se plantea la aproximación de un solo polo y se deriva para este caso particular la expresión de la función de onda a tiempos largos [60] a partir de la expresión que se obtuvo en la sección 4.3, en donde se aplicó el método de la fase estacionaria.

Por último, en la sección 5.3 se presenta el estudio sistemático del problema de decaimiento en la región externa del potencial. Es importante señalar que la solución en la región externa es otra de las principales aportaciones del presente trabajo [61]. Antes de estudiar el límite de tiempos largos, se analiza el comportamiento general de la función de onda. Este análisis involucra el cálculo numérico de las funciones  $M(x, q, t)$ , el cual se hace con una rutina desarrollada por Poppe, *et al.* [62], para calcular a la función  $w(z)$ . Aquí se señala un punto importante que, de no tomarse en cuenta, puede conducir a errores en el cálculo numérico de la función de onda. Por ejemplo, puede llegarse a la situación en que la función de onda de la región externa evaluada en  $r = a$  no sea idéntica a la función de onda de la región interna evaluada también en  $r = a$ , o a que el comportamiento de la función de onda a tiempos largos sea como  $t^{-1/2}$  en vez de  $t^{-3/2}$ . Posteriormente, se hace el análisis de la función de onda a tiempos largos y distancias pequeñas. Por último, en forma análoga a como se hace para la región interna, se plantea la aproximación de un solo polo y se deriva la expresión asintótica para la función de onda que se obtiene a partir de la forma explícita de su propagador.

## 5.1 El Potencial de Alcance Finito y la Función de Onda Inicial

El potencial de alcance finito y con simetría esférica más sencillo que podemos utilizar es el de la delta de Dirac tridimensional. La ventaja de utilizar este potencial reside en que sus polos pueden ser calculados en forma sencilla. Además, puede derivarse en forma explícita al propagador de la función de onda, condición necesaria para hacer uso del método de la fase estacionaria visto en el capítulo 4.

La expresión para el potencial delta de intensidad  $\lambda$  localizado en  $r = a$  es la siguiente:

$$V(r) = \lambda \delta(r - a). \quad (5.1)$$

Además de definir al potencial, debemos establecer la función de onda inicial del problema. La función de onda a  $t = 0$ , que utilizaremos es

$$\Psi(r, 0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \left( \frac{q\pi}{a} r \right) \Theta(a - r), \quad q = 1, 2, \dots, \quad (5.2)$$

que es no-nula sólo en la región interna del potencial gracias a la función de Heaviside,  $\Theta(a - r)$ , *i.e.*, la función de onda inicial normalizada se encuentra confinada en la región interna del potencial ( $r \leq a$ ). Esta función de onda inicial corresponde a los estados de una partícula confinada en una caja de paredes infinitas. En la Figura 5.1 podemos ver una representación pictórica del potencial,  $V(r)$ , y del estado inicial,  $\Psi(r, 0)$ , con  $q = 1$  y  $a = 1$ .

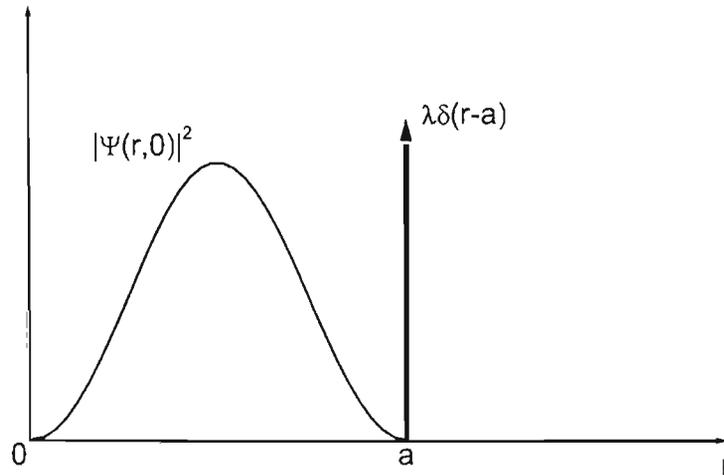
Una vez que hemos definido al potencial de alcance finito,  $V(r)$ , y a la función de onda inicial,  $\Psi(r, 0)$ , podemos obtener en forma explícita los ingredientes fundamentales para el cálculo de todas las cantidades de interés. Esto es, podemos calcular los polos,  $k_n$ , y los estados resonantes,  $u_n(r)$ , que son solución de la ecuación de Schrödinger estacionaria con condiciones de frontera de onda saliente. Además, podemos calcular los coeficientes  $C_n$  y  $\bar{C}_n$  definidos por la función de onda inicial,  $\Psi(r, 0)$ , y las eigenfunciones resonantes,  $u_n(r)$ .

Empezaremos calculando los estados resonantes,  $u_n(r)$ , y los polos complejos,  $k_n$ , del problema utilizando la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (ecuación (2.19)),

$$\frac{d^2 u_n(r)}{dr^2} + [k_n^2 - V(r)] u_n(r) = 0,$$

en donde las soluciones satisfacen las condiciones de frontera de onda saliente (2.20) y (2.21) reescritas también aquí:

$$u_n(0) = 0,$$



**FIGURA 5.1** Representación del potencial delta,  $V(r)$  (ecuación (5.1)), y del estado inicial  $\Psi(r,0)$  (ecuación (5.2)), con  $q = 1$  y  $a = 1$ . El estado inicial está dado por las eigenfunciones de una partícula en una caja de paredes infinitas.

y

$$\left[ \frac{du_n(r)}{dr} \right]_{r=a_+} = ik_n u_n(a), \quad r \geq a.$$

Por tratarse de un potencial de tipo delta, deben de satisfacerse además las condiciones de continuidad de la función de onda y de discontinuidad de su derivada en  $r = a$ , *i.e.*,

$$u_n(a_+) = u_n(a_-), \quad (5.3)$$

$$\left[ \frac{du_n(r)}{dr} \right]_{a_+} - \left[ \frac{du_n(r)}{dr} \right]_{a_-} = \lambda u_n(a). \quad (5.4)$$

Combinando las cuatro ecuaciones anteriores, obtenemos la ecuación para los polos complejos,  $k_n$ , del problema,

$$(ik_n - \lambda) \operatorname{sen}(k_n a) - k_n \cos(k_n a) = 0. \quad (5.5)$$

Como podemos ver, es una ecuación trascendental que podemos resolver en forma numérica. Sin embargo, antes de realizar esta tarea, conviene destacar algunas características impor-

tantes de los polos  $k_n$ . Si la intensidad de la delta,  $\lambda$ , tiende a infinito (es decir, se vuelve una pared infinita), entonces la ecuación se satisfará para valores de  $k_n$  tales que  $\text{sen}(k_n a) = 0$ , es decir, si los polos son tales que  $\text{Re}(k_n) = n\pi/a$  y  $\text{Im}(k_n) = 0$ . Vemos entonces que, en el límite  $\lambda \rightarrow \infty$ , obtenemos los eigenvalores del problema de una partícula en una caja de paredes infinitas, como era de esperarse. En cambio, si  $\lambda$  tiende a cero (no hay potencial), entonces los eigenvalores serán aquellos para los cuales se cumpla que  $\tan(k_n a) = -i$ . condición que se satisface si  $\text{Im}(k_n) \rightarrow -\infty$ . Como el negativo de la parte imaginaria de  $k_n$  corresponde a la anchura de la  $n$ -ésima resonancia, estamos obteniendo que en este caso éstas tienen anchura infinita, por lo que se traslapan unas con otras y obtenemos así los eigenvalores del continuo, es decir, obtenemos la solución para la partícula libre. Para los valores intermedios de  $\lambda$ , los polos variarán suavemente entre estos dos límites como lo muestra la Figura 5.2.

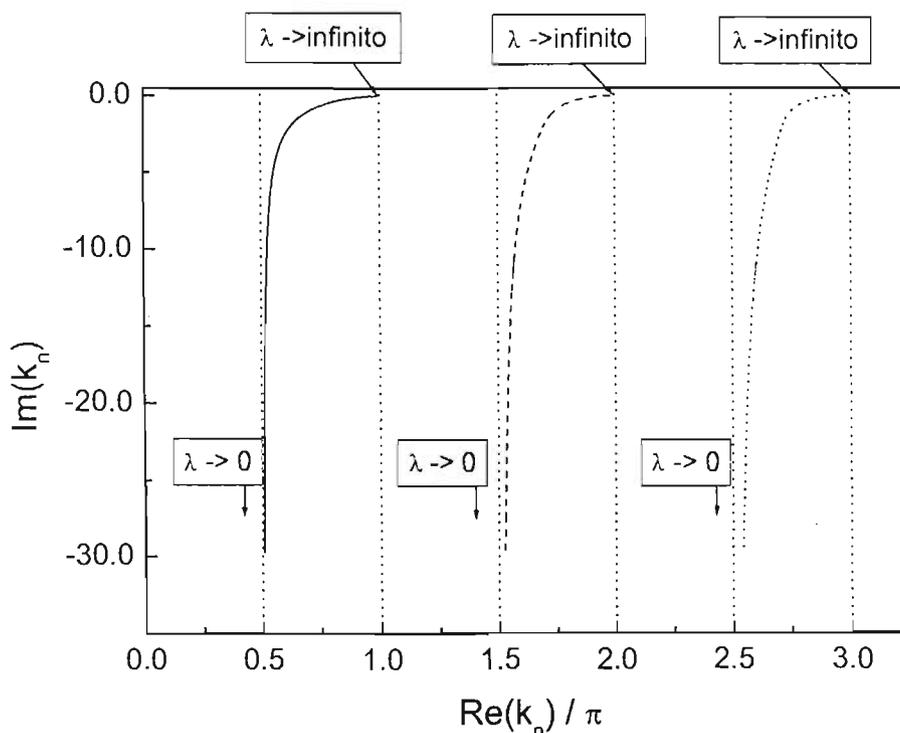


FIGURA 5.2 Dependencia de los primeros tres polos resonantes:  $k_1$  (línea sólida),  $k_2$  (línea a trazos) y  $k_3$  (línea a puntos), con respecto a variaciones del parámetro  $\lambda$  ( $a = 1$ ).

Recordemos también que, debido a la invariancia ante inversión temporal [46], para cada polo complejo  $k_n = \alpha_n - i\beta_n$  situado en el cuarto cuadrante del plano complejo  $k$ , existe un polo complejo  $k_{-n} = -k_n^*$  situado en el tercer cuadrante de este plano. Por lo tanto, sólo necesitamos calcular los polos del cuarto cuadrante para determinar todos los polos resonantes del problema. Para el cálculo numérico de los polos utilizamos el método de Newton-Raphson [59]; los valores iniciales se calcularon a partir de los valores en los límites  $\lambda \rightarrow 0$  y  $\lambda \rightarrow \infty$ .

A continuación presentamos una tabla con los primeros 10 polos del cuarto cuadrante del plano complejo para el valor de  $\lambda = 200$  y  $a = 1$ :

$n$	$k_n$
1	$3.13 - 2.43 \times 10^{-4}i$
2	$6.26 - 9.70 \times 10^{-4}i$
3	$9.39 - 2.18 \times 10^{-3}i$
4	$12.50 - 3.86 \times 10^{-3}i$
5	$15.63 - 6.00 \times 10^{-3}i$
6	$18.76 - 8.60 \times 10^{-3}i$
7	$21.88 - 1.16 \times 10^{-2}i$
8	$25.01 - 1.51 \times 10^{-2}i$
9	$28.14 - 1.90 \times 10^{-2}i$
10	$31.26 - 2.32 \times 10^{-2}i$

Encontraremos ahora la forma explícita de las eigenfunciones resonantes regresando nuestra atención a las condiciones (5.1) y (5.1). La primera de las condiciones (ecuación (5.1)) nos define a las eigenfunciones  $u_n(r)$  en la región interna del potencial. Esta condición se cumple si

$$u_n(r) = A_n \operatorname{sen}(k_n r), \quad r \leq a, \quad (5.6)$$

en donde  $A_n$  es la constante de normalización de los estados resonantes calculada a partir de la ecuación (2.23), de modo que

$$A_n = \sqrt{\frac{2\lambda}{\lambda a + e^{-2ik_n a}}}. \quad (5.7)$$

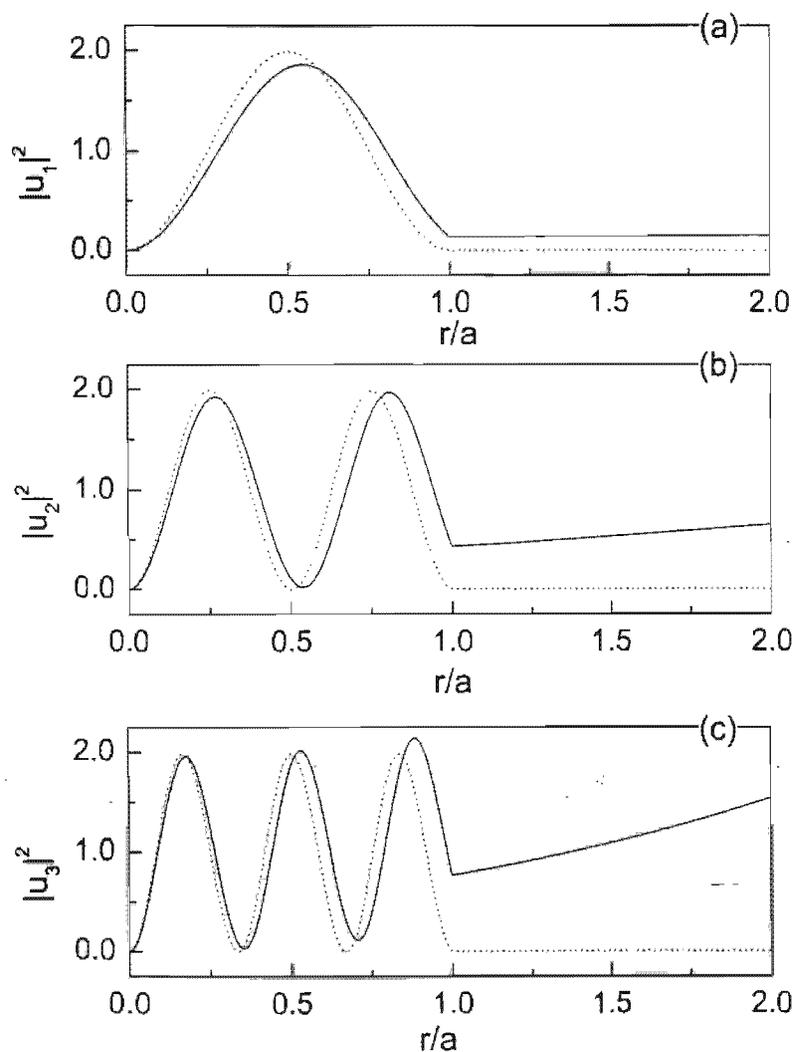
La segunda de las condiciones (ecuación (5.1)) es la condición de onda saliente para las eigenfunciones a partir de  $r = a$ , condición que se satisface proponiendo

$$u_n(r) = B_n e^{ik_n r}, \quad r \geq a, \quad (5.8)$$

donde el coeficiente  $B_n$  es la constante de normalización que se calcula con ayuda de la ecuación (2.23):

$$B_n = -\sqrt{\frac{2\lambda}{\lambda a + e^{-2ik_n a}}} \frac{k_n}{\lambda} e^{-2ik_n a}. \quad (5.9)$$

En la Figura 5.3 presentamos la densidad de probabilidad,  $|u_n(r)|^2$  de las primeras tres eigenfunciones resonantes para los valores de  $\lambda = 10$  y  $\lambda = 200$ . Para comparar con los



**FIGURA 5.3** Módulo cuadrado de los tres primeros estados resonantes,  $|u_n(r)|^2$ : (a)  $n = 1$ , (b)  $n = 2$  y (c)  $n = 3$  usando los parámetros  $a = 1$ ,  $\lambda = 10$  (línea sólida) y  $\lambda = 200$  (línea a trazos).

valores para  $\lambda = 200$  (presentados en la página 34), mostramos a continuación los valores de los primeros tres polos para  $\lambda = 10$ :

$n$	$k_n$
1	$2.88 - 6.65 \times 10^{-2}i$
2	$5.84 - 2.06 \times 10^{-1}i$
3	$8.88 - 3.48 \times 10^{-1}i$

Como podemos observar en la Figura 5.3, en la región interna ( $0 < r < a$ ), las eigenfunciones exhiben una simetría similar a la de los estados de una partícula en una caja de paredes infinitas. Nótese el cambio drástico de la  $|u_n(r)|^2$  en la región externa, donde se presenta un comportamiento de crecimiento exponencial como función de la posición. Este comportamiento de las eigenfunciones en la región externa ha hecho pensar que los estados resonantes, o estados de Gamow, no pueden ser utilizados para describir el problema de decaimiento. Sin embargo, a través de los años, se ha demostrado que describen a la perfección dicho problema. En particular, estos estados pueden ser visualizados como parte de un conjunto completo de estados que además incluye a los estados ligados y un continuo de funciones de onda [30].

Ahora calcularemos los coeficientes  $C_n$  y  $\bar{C}_n$  dados por las ecuaciones (2.41) y (2.43), es decir, por las ecuaciones

$$C_n = \int_0^a \Psi(r, 0) u_n(r) dr; \quad \bar{C}_n = \int_0^a \Psi^*(r, 0) u_n(r) dr. \quad (5.10)$$

Dado que en nuestro ejemplo  $\Psi(r, 0)$  es una función real, ambos coeficientes son iguales, es decir,

$$\begin{aligned} C_n &= \bar{C}_n = \sqrt{\frac{2}{a}} A_n \int_0^a \operatorname{sen}\left(\frac{q\pi}{a} r\right) \operatorname{sen}(k_n r) dr, \\ &= \sqrt{\frac{\lambda a}{\lambda a + e^{-2ik_n a}}} \left[ \frac{\operatorname{sen}(q\pi - k_n a)}{q\pi - k_n a} - \frac{\operatorname{sen}(q\pi + k_n a)}{q\pi + k_n a} \right], \\ &= \sqrt{\frac{\lambda a}{\lambda a + e^{-2ik_n a}}} \left[ \frac{2q\pi \operatorname{sen}(k_n a)(-1)^q}{k_n^2 a^2 - q^2 \pi^2} \right]. \end{aligned} \quad (5.11)$$

A continuación verificaremos la validez de las reglas de suma dadas por las ecuaciones (2.44), (2.45) y (2.46) para cuando los parámetros del sistema son  $\lambda = 200$  y  $a = 1$ . En la Figura 5.4 mostramos como cambia el valor de la suma

$$S1_M = \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left[ \sum_{m=1}^M C_m^2 \right],$$

conforme aumentamos el número  $M$  de términos sumados y notamos que efectivamente tiende a 1 en concordancia con la ecuación (2.44). En las Figuras 5.5 y 5.6 mostramos como cambian los valores de las sumas

$$S2_M = \operatorname{Im} \left[ \sum_{m=1}^M \frac{C_m^2}{k_m} \right],$$

y

$$S3_M = \operatorname{Im} \left[ \sum_{m=1}^M C_m^2 k_m \right],$$

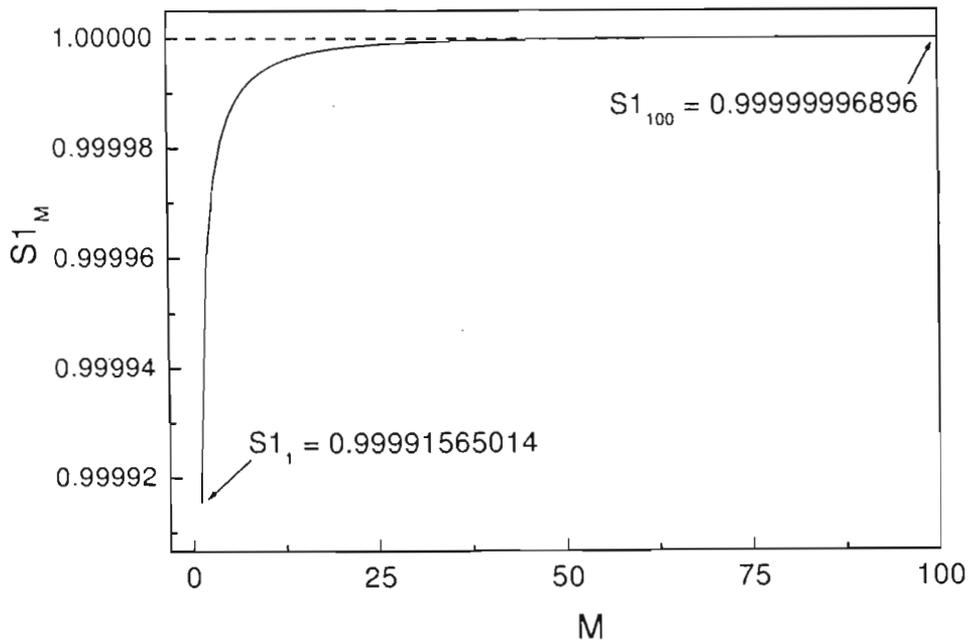


FIGURA 5.4 Verificación de la primera regla de suma (ecuación (2.44)), para los coeficientes  $C_n$  y  $\tilde{C}_n$ . La intensidad del potencial es  $\lambda = 200$ .

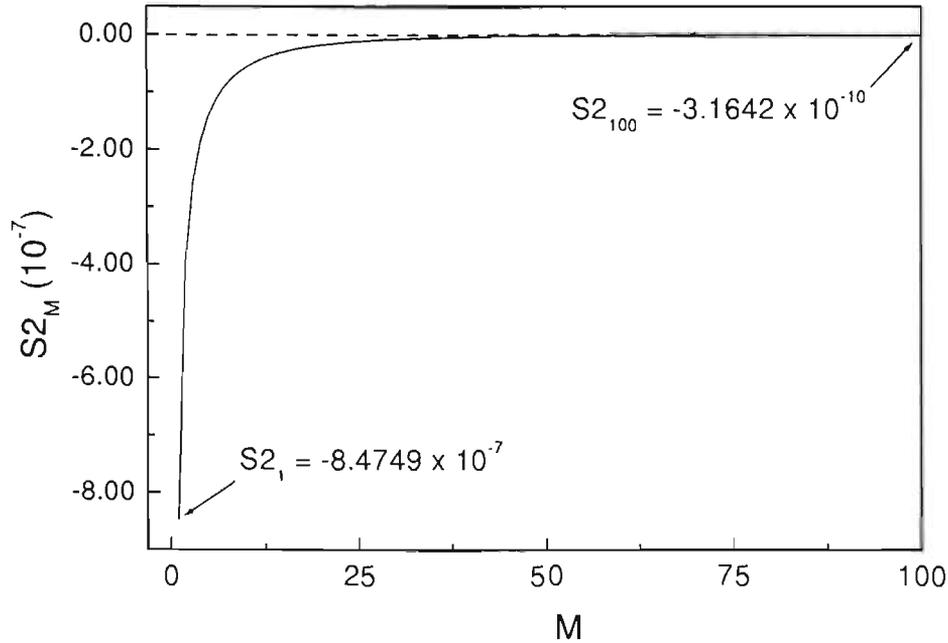


FIGURA 5.5 Verificación de la segunda regla de suma (ecuación (2.45)), para los coeficientes  $C_n$  y  $\tilde{C}_n$ . La intensidad del potencial es  $\lambda = 200$ .

respectivamente, y notamos que ambas tienden a cero conforme aumentamos el número  $M$  de términos sumados de acuerdo con las ecuaciones (2.45) y (2.46).

Una vez que tenemos los ingredientes principales, es decir, los polos complejos,  $k_n$ , las eigenfunciones resonantes,  $u_n(r)$ , y los coeficientes  $C_n$  y  $\tilde{C}_n$ , estamos en posición de calcular todas aquellas cantidades que caracterizan a nuestro problema<sup>1</sup>. Esto es, podemos estudiar a la función de onda para la región interna,  $\Psi_{in}(r, t)$ , y a sus cantidades asociadas, tales como las probabilidades de supervivencia,  $S(t)$ , y de no-escape,  $P(t)$ . También podemos calcular a la función de onda para la región externa,  $\Psi_{ex}(r, t)$ , y estudiarla para diferentes casos.

<sup>1</sup>Notemos que el estado inicial se eligió de tal forma que para un valor de  $q$  dado, posea características similares a la de la eigenfunción resonante correspondiente al polo  $q$ . Suponemos que esta situación se debe de reflejar de alguna forma en los resultados que obtengamos.

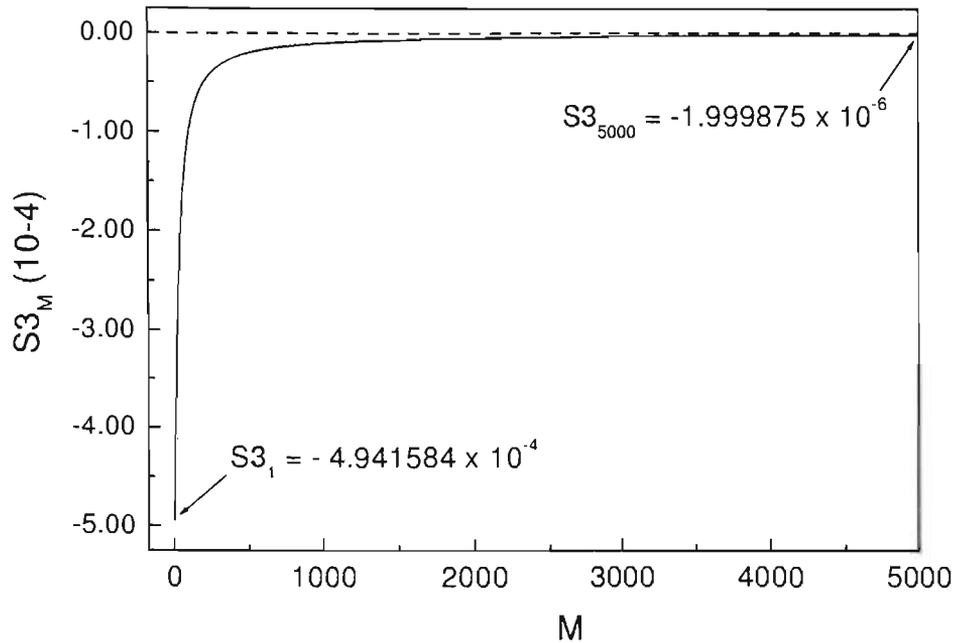


FIGURA 5.6 Verificación de tercera regla de suma (ecuación (2.46)), para los coeficientes  $C_n$  y  $\bar{C}_n$ . La intensidad del potencial es  $\lambda = 200$ .

## 5.2 Cálculos en la Región Interna

A continuación presentaremos los resultados que se obtienen en la región interna para el caso del potencial delta de Dirac. Como mencionamos al inicio del capítulo, sólo presentaremos el decaimiento de tipo exponencial y sus desviaciones a tiempos largos. En esta sección reproduciremos algunos de los resultados presentados en las referencias [18], [19], [25] y [45]. Además confirmaremos los cálculos a través del método de la fase estacionaria desarrollado en la sección 4.3 del capítulo anterior. Es importante destacar que el uso del método de la fase estacionaria para obtener el comportamiento a tiempos largos de la función de onda, confinada inicialmente dentro de la región del potencial delta, y para cualquier región del espacio, es una de las contribuciones importantes del presente trabajo [60].

### 5.2.1 La función de onda a tiempos largos

Las contribuciones exponencial y de desviaciones a tiempos largos para la función de onda se pueden obtener a partir de la ecuación (4.10) agregándole el término que corresponde al decaimiento exponencial (ver ecuación (4.8)). Esto es, podemos escribir a la función de onda de la región interna como

$$\Psi_{in}(r, t) = \sum_{m=1}^{\infty} C_m u_m(r) e^{-ik_m^2 t} - i\alpha \operatorname{Im} \left[ \sum_{m=1}^{\infty} \frac{C_m u_m(r)}{k_m^3} \right] \left( \frac{1}{t^{3/2}} \right), \quad (5.12)$$

con  $\alpha = e^{-i\pi/4}/2\sqrt{\pi}$ .

En la Figura 5.7 presentamos el comportamiento de la densidad de probabilidad de la región interna,  $|\Psi_{in}(r, t)|^2$ , como función de la posición a diferentes tiempos. Estos tiempos están reescalados en unidades de vida media del primer polo, es decir, con respecto a su tiempo de vida  $\tau_1 = 1/(4\alpha_1\beta_1)$  donde  $\alpha_1$  y  $\beta_1$  son la parte real y el negativo de la parte imaginaria de ese polo, respectivamente. En todos los casos se utilizó el valor de  $\lambda = 200$  y un total de 10 polos<sup>2</sup>. Notemos que a un tiempo corto ( $t/\tau_1 = 10^{-2}$  vm), la función de onda interna es prácticamente igual a la función de onda inicial ( $t/\tau_1 = 0$  vm), es decir, la función de onda todavía no ha cambiado de manera significativa. Sin embargo, a tiempos posteriores (1 vm en adelante), la función decae significativamente. Además, la función de onda pasa de ser una función simétrica con respecto a  $r = a/2$  a ser una función asimétrica conforme abandona la región interna.

### 5.2.2 Las probabilidades de supervivencia, $S(t)$ , y de no-escape, $P(t)$

A partir de la ecuación (5.12) podemos calcular a la amplitud y a la probabilidad de supervivencia,  $A(t)$  [19, 18] y  $S(t)$ , respectivamente, obteniendo

$$A(t) = \sum_{m=1}^{\infty} C_m^2 e^{-ik_m^2 t} - i\alpha \operatorname{Im} \left[ \sum_{m=1}^{\infty} \frac{C_m^2}{k_m^3} \right] \left( \frac{1}{t^{3/2}} \right), \quad (5.13)$$

y

---

<sup>2</sup>En todo el trabajo hacemos los cálculos sólo con 10 polos que es el número de polos a partir del cual las gráficas no cambian apreciablemente.

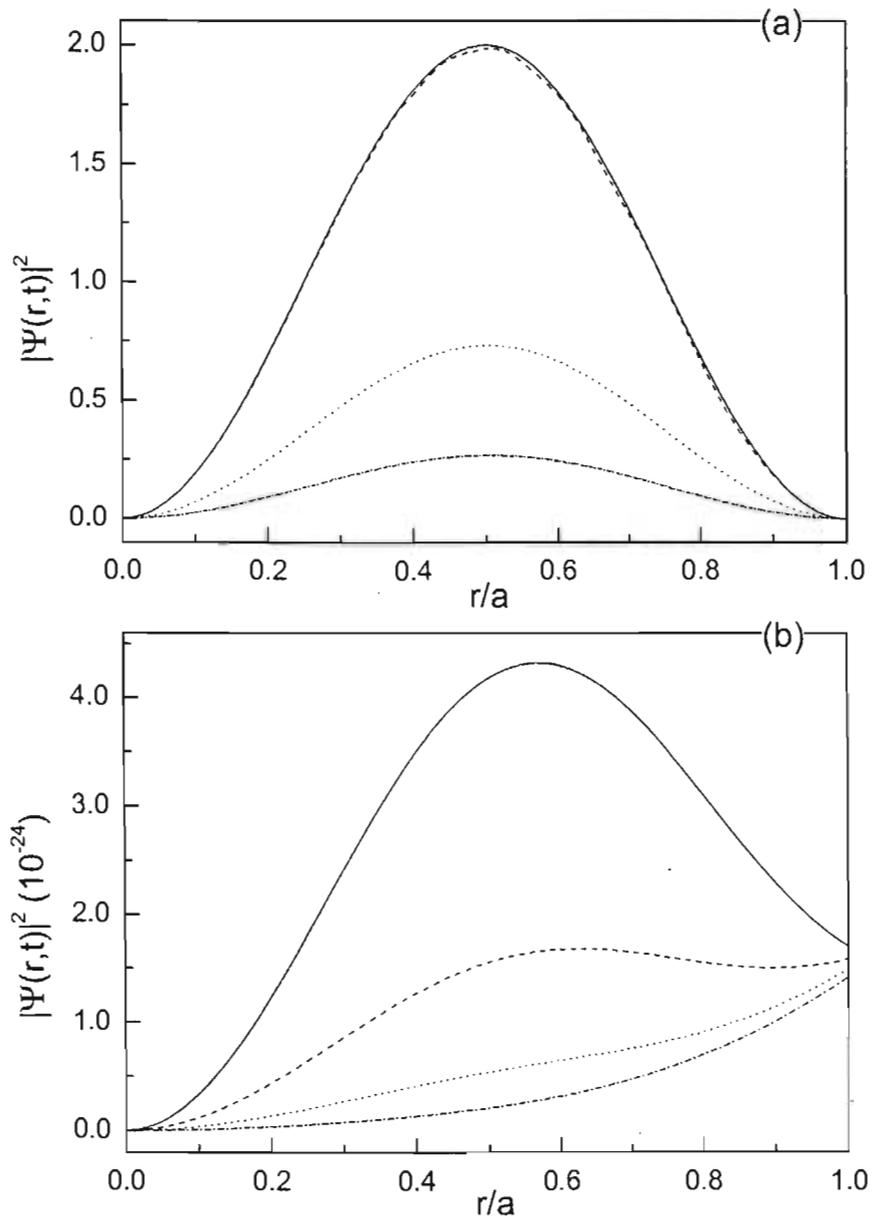


FIGURA 5.7 Densidad de probabilidad en la región interna,  $|\Psi_{in}|^2$ , como función de la posición. (a)  $t/\tau_1 = 0$  vm (línea sólida),  $10^{-2}$  vm (línea a trazos), 1 vm (línea a puntos) y 2 vm (línea a trazos y puntos). (b) 55 vm (línea sólida), 56 vm (línea a trazos), 57 vm (línea a puntos) y 58 vm (línea a trazos y puntos). Los parámetros del sistema son  $\lambda = 200$ ,  $a = 1$  y se consideró la contribución de 10 polos.

$$\begin{aligned}
S(t) &= \sum_{m,s=1}^{\infty} C_m^2 C_s^{2*} e^{-i(k_m^2 - k_s^{2*})t} - 2 \operatorname{Im} \left[ \alpha^* \sum_{m=1}^{\infty} C_m^2 e^{-ik_m^2 t} \right] \operatorname{Im} \left[ \sum_{m=1}^{\infty} \frac{C_m^2}{k_m^3} \right] \left( \frac{1}{t^{3/2}} \right) \\
&+ |\alpha|^2 \operatorname{Im} \left[ \sum_{m=1}^{\infty} \frac{C_m^2}{k_m^3} \right]^2 \left( \frac{1}{t^3} \right), \tag{5.14}
\end{aligned}$$

la cual es una expresión en donde vemos claramente, y en forma separada, las contribuciones exponencial y de tiempos largos (en donde se comporta como  $t^{-3}$ ). El segundo término de la parte derecha de la ecuación corresponde a la interferencia entre ambos comportamientos que, como veremos mas adelante, es el responsable de las oscilaciones que aparecen entre el cambio de un comportamiento al otro.

A partir de la ecuación (5.12), podemos calcular también la forma explícita de la probabilidad de no-escape,  $P(t)$ , obteniendo

$$\begin{aligned}
P(t) &= \sum_{m,s=1}^{\infty} C_m C_s^* I_{ms} e^{-i(k_m^2 - k_s^{2*})t} \\
&- \operatorname{Re} \left\{ \alpha \sum_{m,s=1}^{\infty} \left[ \frac{C_m C_s^*}{k_m^3} I_{ms} - \frac{C_m^* C_s}{k_m^{3*}} \bar{I}_{ms} \right] e^{ik_s^{2*} t} \right\} \left( \frac{1}{t^{3/2}} \right) \\
&+ \frac{|\alpha|^2}{2} \operatorname{Re} \left\{ \sum_{m,s=1}^{\infty} \left[ \frac{C_m C_s^*}{k_m^3 k_s^{3*}} I_{ms} - \frac{C_m^* C_s}{k_m^{3*} k_s^3} \bar{I}_{ms} \right] \right\} \left( \frac{1}{t^3} \right), \tag{5.15}
\end{aligned}$$

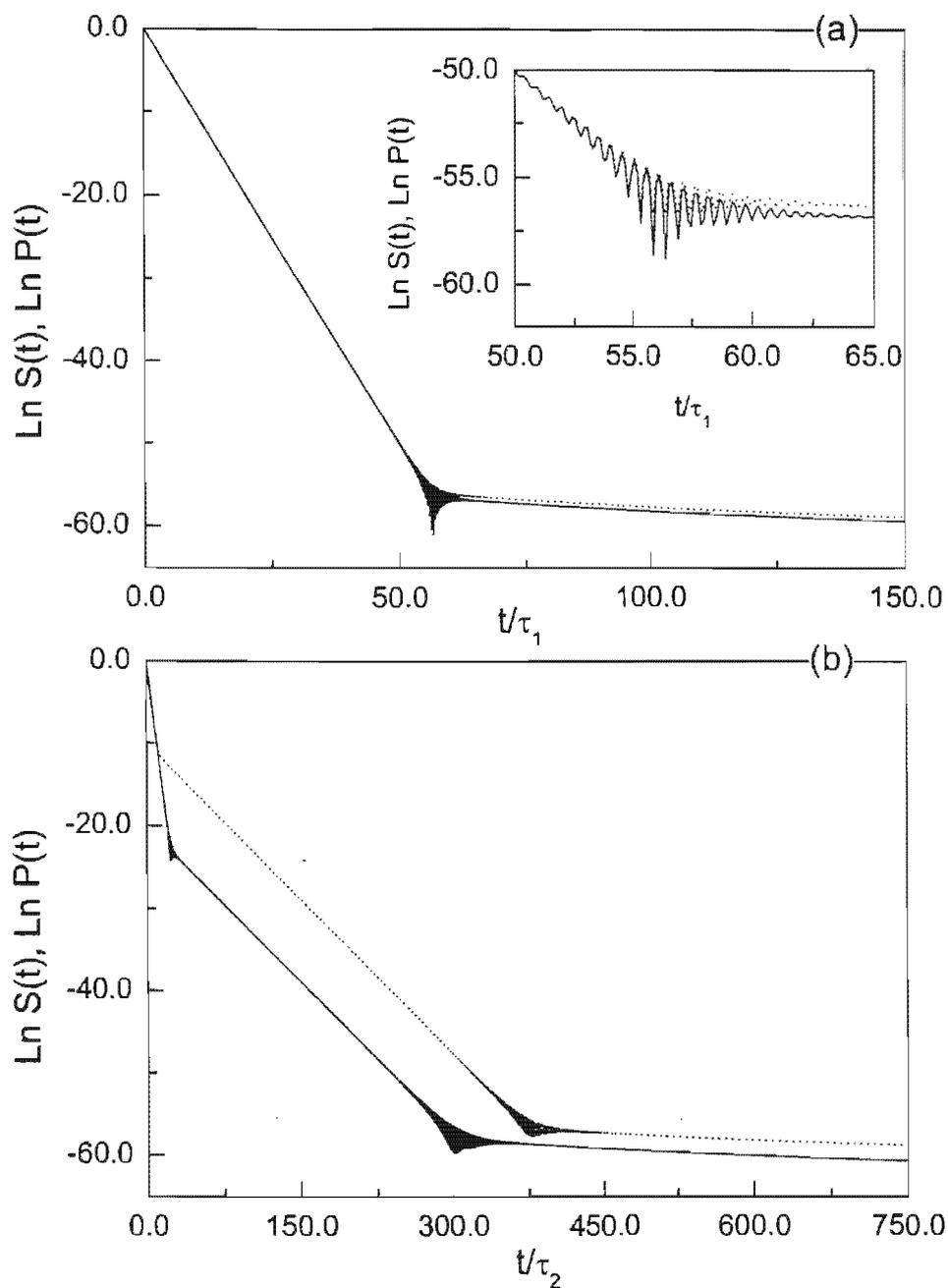
la cual también se comporta como  $t^{-3}$  a tiempos largos y consta además de un término exponencial y otro de interferencia. Los coeficientes  $I_{ms}$  e  $\bar{I}_{ms}$  están dados por las ecuaciones (4.13) y (4.14), respectivamente:

$$I_{ms} = \frac{u_m(a) u_s^*(a)}{i(k_m - k_s^*)}, \tag{5.16}$$

e

$$\bar{I}_{ms} = \delta_{ms} - \frac{u_m^*(a) u_s^*(a)}{i(k_m^* + k_s^*)}. \tag{5.17}$$

En la Figura 5.8 comparamos a la probabilidad de supervivencia,  $S(t)$ , con la probabilidad de no-escape,  $P(t)$ , para dos casos diferentes. El primero corresponde al caso en que el estado inicial se asemeja al primer estado resonante,  $u_1$ , es decir,  $q = 1$  en la ecuación (5.2). El segundo corresponde al caso en que estado inicial se asemeja al segundo estado resonante,  $u_2$ , es decir,  $q = 2$ . En las gráficas podemos corroborar que, además de tratarse de cantidades por definición diferentes, también lo son en su comportamiento. Graficamos



**FIGURA 5.8** Comparación entre la probabilidad de supervivencia (línea sólida) y la probabilidad de no-escape (línea a puntos) para dos estados iniciales distintos: (a)  $q = 1$  y (b)  $q = 2$ . Los parámetros del sistema son  $(\lambda, a) = (200, 1)$ . En el cálculo se utilizaron las ecuaciones (5.14) y (5.15) considerando la contribución de 10 polos.

el logaritmo natural de las dos probabilidades para destacar sus comportamientos ya que en su decaimiento se involucran varios órdenes de magnitud, además así podemos identificar claramente la región de decaimiento exponencial que aparece como una línea recta. Para el caso  $q = 1$ , notamos que en ambas probabilidades existe, en primer lugar, una región de decaimiento exponencial, caracterizada por una recta de pendiente  $-\Gamma_1 = 2 \text{Im}(k_1^2)$ , seguida del decaimiento no-exponencial, que a tiempos largos se comporta como  $t^{-3}$ . También observamos que la transición entre ambos comportamientos: exponencial y no-exponencial, está caracterizado por un régimen oscilatorio. Dichas oscilaciones se muestran con detalle en el recuadro de la Figura 5.8 (a), en donde hemos amplificado esa región. El origen de este comportamiento es la interferencia que existe entre los términos que describen al comportamiento exponencial y al no-exponencial que, en esa región, son del mismo orden. Es a partir de esta región de interferencia en donde se puede apreciar más claramente la diferencia entre  $S(t)$  y  $P(t)$ . Por otro lado, para el caso  $q = 2$ , que corresponde al decaimiento de un estado excitado, observamos que la dinámica es totalmente distinta a la observada en el estado base  $q = 1$ . Esto se ilustra en la Figura 5.8 (b), en donde se aprecia que antes de que  $S(t)$  y  $P(t)$  manifiesten el comportamiento no-exponencial a tiempos largos de  $t^{-3}$ , existen dos regímenes de decaimiento de tipo exponencial. El primero de ellos es un decaimiento exponencial caracterizado por una recta de pendiente  $-\Gamma_2 = 2 \text{Im}(k_2^2)$  debido al decaimiento del estado inicial al estado base, seguido de otro decaimiento exponencial de pendiente diferente ( $-\Gamma_1$ ) debido al decaimiento del estado base. En este caso, las diferencias entre ambas probabilidades son más evidentes. En ambos casos se utilizó el mismo valor de intensidad de la delta,  $\lambda = 200$ .

### 5.2.3 La aproximación de un solo polo

De los cálculos de la sección anterior podemos conjeturar que, independientemente del estado inicial, en la región de decaimiento exponencial siempre llegaremos a una situación en donde éste estará gobernado por el primer polo resonante, en donde el decaimiento es de la forma  $e^{-\Gamma_1 t}$ . Con esto en mente, cabe esperar que sea una muy buena aproximación tomar sólo el término correspondiente a ese primer polo en la suma de exponenciales de la ecuación de la función de onda de la región interna, es decir, tomar sólo el término  $m = 1$  de la primera de las sumas de la ecuación (5.12). Realizando esta aproximación obtenemos

una nueva expresión para la función de onda de la región interna

$$\Psi_{in}(r, t) = C_1 u_1(r) e^{-ik_1^2 t} - i\alpha \operatorname{Im} \left[ \sum_{m=1}^{\infty} \frac{C_m u_m(r)}{k_m^3} \right] \left( \frac{1}{t^{3/2}} \right). \quad (5.18)$$

así como para sus cantidades asociadas, es decir, para la probabilidad de supervivencia [18],

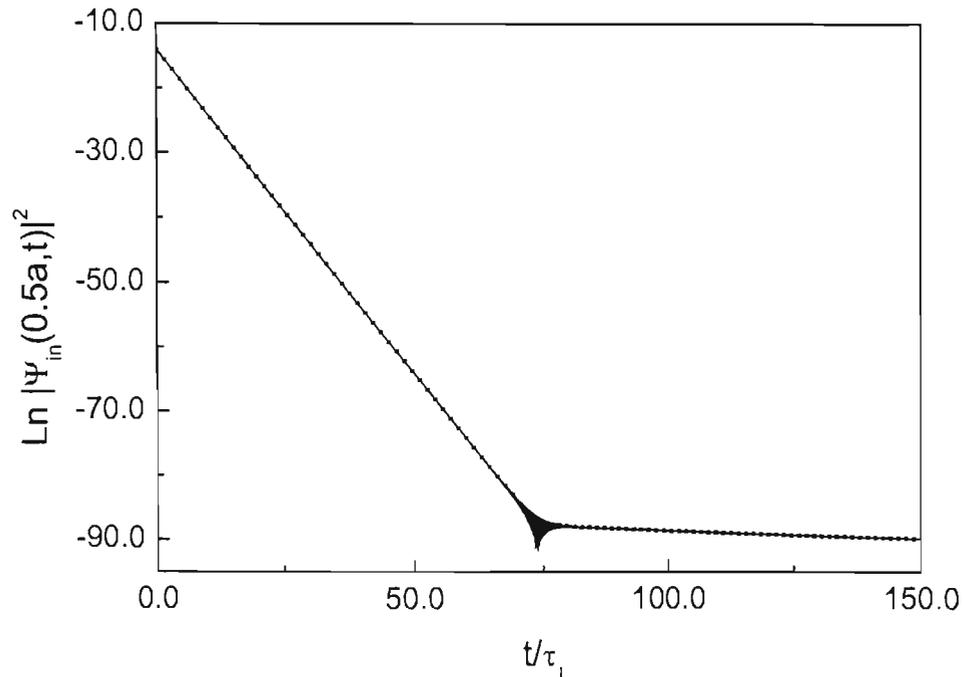
$$S(t) = |C_1^2|^2 e^{-\Gamma_1 t} - 2 \operatorname{Im} \left[ \alpha^* C_1^2 e^{-ik_1^2 t} \right] \operatorname{Im} \left[ \sum_{m=1}^{\infty} \frac{C_m^2}{k_m^3} \right] \left( \frac{1}{t^{3/2}} \right) + |\alpha|^2 \operatorname{Im} \left[ \sum_{m=1}^{\infty} \frac{C_m^2}{k_m^3} \right]^2 \left( \frac{1}{t^3} \right), \quad (5.19)$$

y para la probabilidad de no-escape

$$\begin{aligned} P(t) &= |C_1|^2 I_{11} e^{-\Gamma_1 t} \\ &- \operatorname{Re} \left\{ \alpha \sum_{m=1}^{\infty} \left[ \frac{C_m C_1^*}{k_m^3} I_{m1} - \frac{C_m^* C_1}{k_m^{3*}} \bar{I}_{m1} \right] e^{ik_1^2 t} \right\} \left( \frac{1}{t^{3/2}} \right) \\ &+ \frac{|\alpha|^2}{2} \operatorname{Re} \left\{ \sum_{m,s=1}^{\infty} \left[ \frac{C_m C_s^*}{k_m^3 k_s^{3*}} I_{ms} - \frac{C_m^* C_s}{k_m^{3*} k_s^3} \bar{I}_{ms} \right] \right\} \left( \frac{1}{t^3} \right), \end{aligned} \quad (5.20)$$

el cual es también un resultado nuevo derivado de la ecuación (5.15) y en donde  $\Gamma_1 = -2 \operatorname{Im}(k_1^2)$ .

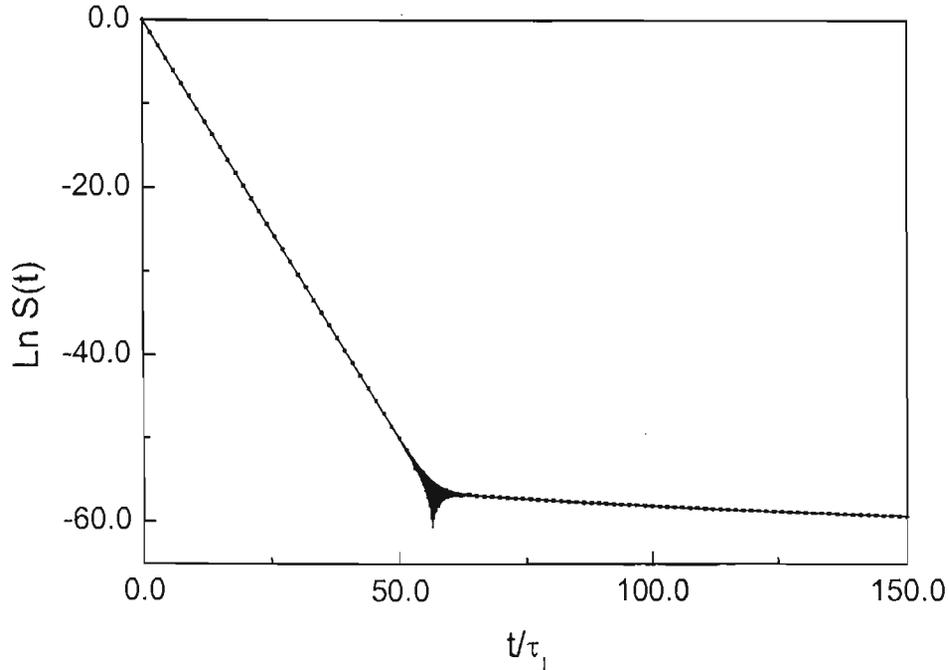
En las Figuras 5.9 a 5.14 comprobamos que, tanto para la función de onda de la región interna, como para las probabilidades de supervivencia y de no-escape, la aproximación de un solo polo es bastante buena. En particular, si el estado inicial se parece al primer estado resonante,  $q = 1$ , esta aproximación resulta ser excelente.



**FIGURA 5.9** Verificación de la aproximación de un solo polo en la región exponencial (línea a cuadros) para la función de onda de la región interna (ecuación (5.18)) para el caso  $r/a = 0.5$  con  $q = 1$ . Para poder comparar, se incluye el cálculo exacto (ecuación (5.12)) (línea sólida) calculada con 10 polos. Los parámetros del potencial son  $\lambda = 5000$  y  $a = 1$ .

Cuando el estado inicial se parece a un estado resonante mayor,  $q = 2$  y  $q = 5$ , vemos que utilizando la aproximación de un solo polo somos capaces únicamente de describir del decaimiento exponencial caracterizado por el primer polo en adelante. Los valores de  $\lambda$  que utilizamos para realizar los cálculos son,  $\lambda = 5000$  para las gráficas de la función de onda y  $\lambda = 200$  para las gráficas de las probabilidades de supervivencia y de no-escape.

Con esta aproximación es posible, por lo menos a partir de cierto tiempo en adelante, describir el decaimiento sin importar cuál fue el estado inicial. Esto nos muestra que el sistema eventualmente pierde memoria de su configuración original.



**FIGURA 5.10** Verificación de la aproximación de un solo polo en la región exponencial (línea a cuadros) para la probabilidad de supervivencia (ecuación (5.14)) con  $q = 1$ . Para poder comparar, se incluye el cálculo exacto (ecuación (5.19)) (línea sólida) calculada con 10 polos. Los parámetros del potencial son  $\lambda = 200$  y  $a = 1$ .

#### 5.2.4 El método de la fase estacionaria

Recordemos una de las aportaciones importantes presentada en la sección (4.3), en donde, utilizando el método de la fase estacionaria, calculamos una expresión para la función de onda a tiempos largos válida para todo el espacio. En esta subsección utilizaremos dicha expresión para desarrollar una ecuación para el comportamiento a tiempos largos de la función de onda en la región interna. A partir de ella, desarrollaremos las ecuaciones correspondientes para las probabilidades de supervivencia y de no-escape.

Para poder utilizar la ecuación (4.24)

$$\Psi(r, t) = \alpha \dot{C}(r, 0) \left( \frac{1}{t^{3/2}} \right), \quad (5.21)$$

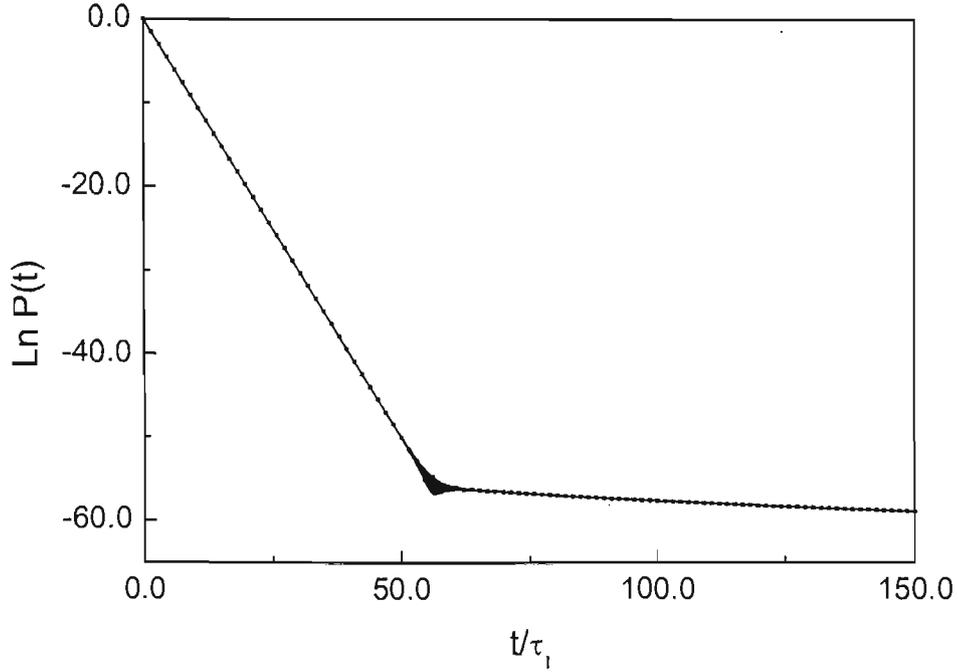


FIGURA 5.11 Verificación de la aproximación de un solo polo en la región exponencial (línea a cuadros) para la probabilidad de no-escape (ecuación (5.15)) con  $q = 1$ . Para poder comparar, se incluye el cálculo exacto (ecuación (5.20)) (línea sólida) calculada con 10 polos. Los parámetros del potencial son  $\lambda = 200$  y  $a = 1$ .

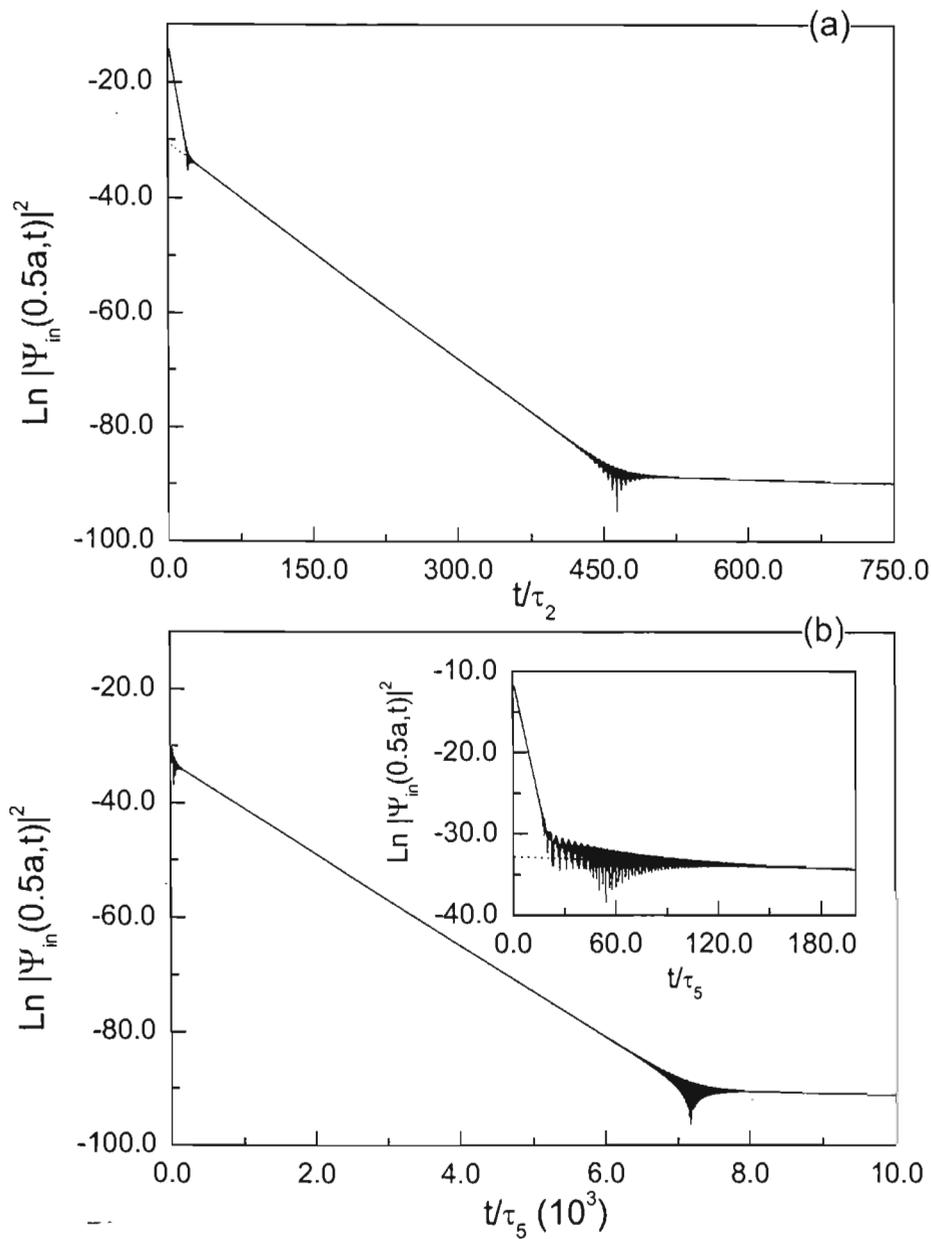
en donde

$$\dot{C}(r, 0) = \int_0^a \Psi(r', 0) \left[ \frac{\partial G^+(r, r'; k)}{\partial k} \right]_{k=0} dr'. \quad (5.22)$$

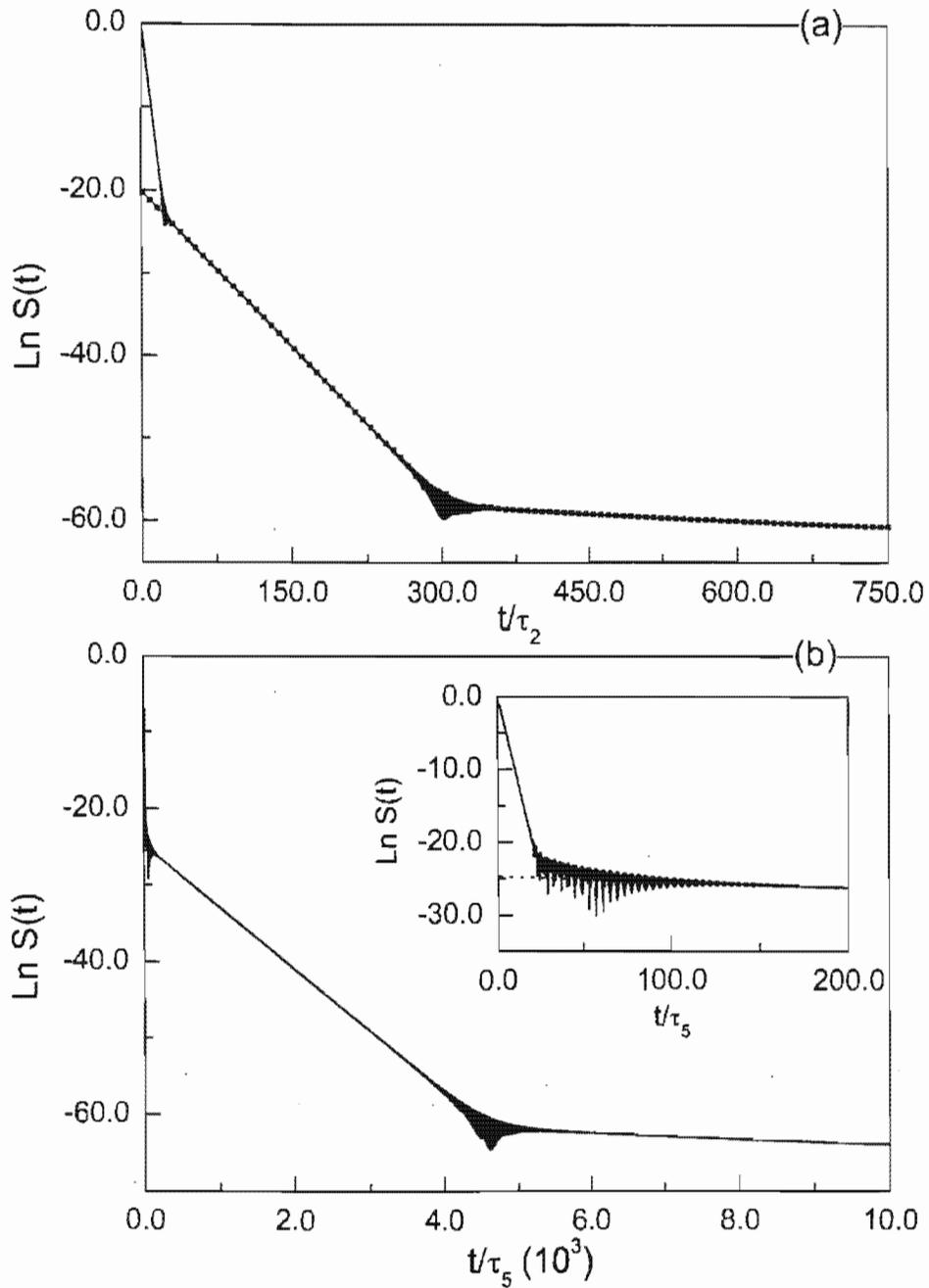
Es necesario contar con la forma explícita de la función de Green saliente para la región interna,  $G_{in}^+(r, r'; k)$ , para el potencial delta. Esta función la obtendremos a partir de la ecuación (2.15):

$$G^+(r, r'; k) = -\frac{\phi(k, r') f(k, r)}{W(k)}, \quad (5.23)$$

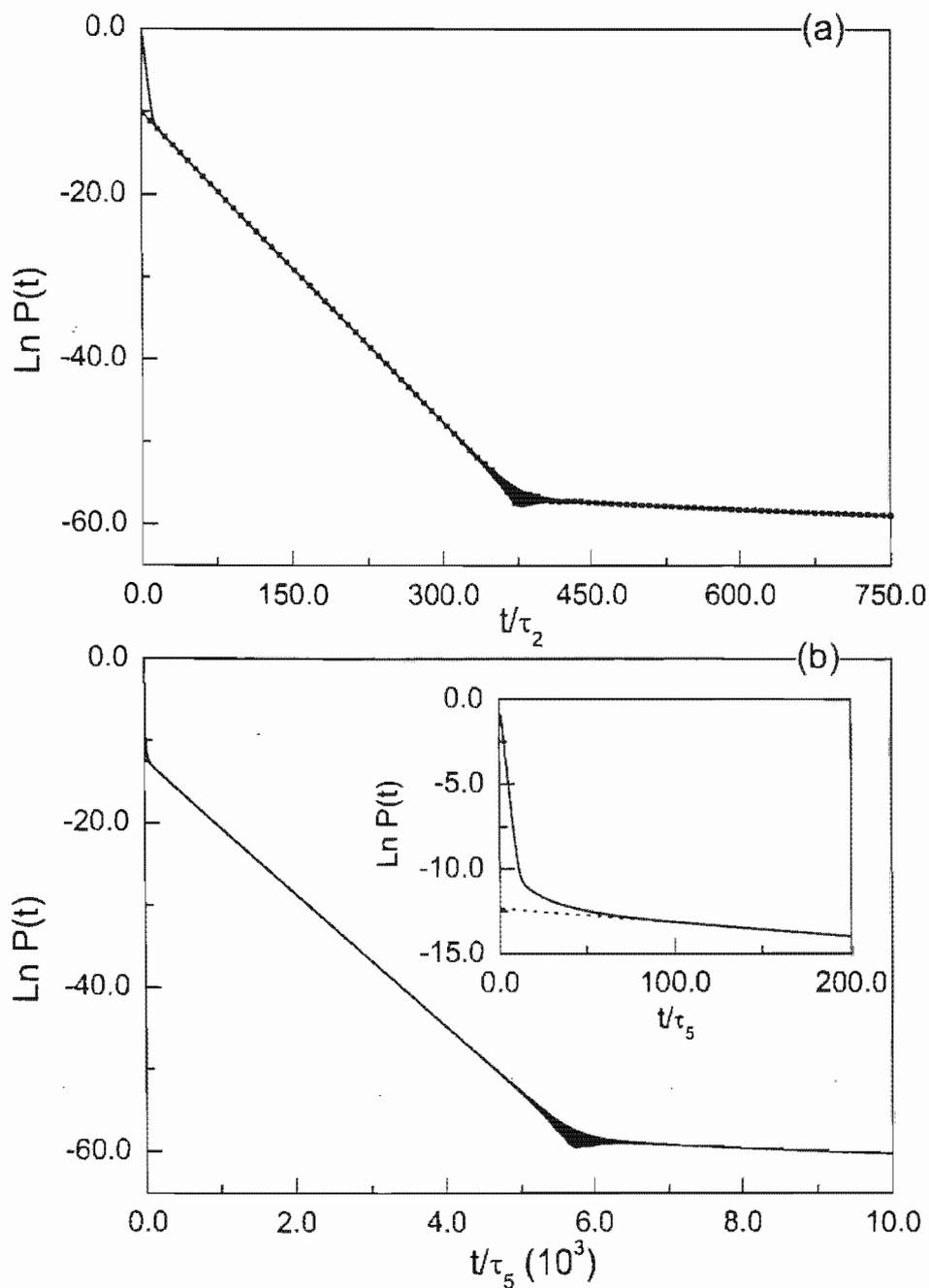
en donde  $\phi(k, r')$  representa a la solución regular de la ecuación de Schrödinger,  $f(k, r)$  es una función con condición de onda saliente a partir de  $r = a$ , y  $W(k)$  es el Wronskiano de  $f(k, r)$  y  $\phi(k, r)$ . Siguiendo el procedimiento presentado por Newton [28] para el potencial



**FIGURA 5.12** Verificación de la aproximación de un solo polo en la región exponencial (línea a cuadros) para la función de onda de la región interna (ecuación (5.18)) para el caso  $r/a = 0.5$  con (a)  $q = 2$  y (b)  $q = 5$ . Para poder comparar, se incluye el cálculo exacto (ecuación (5.12)) (línea sólida) calculada con 10 polos. Los parámetros del potencial son  $\lambda = 5000$  y  $a = 1$ .



**FIGURA 5.13** Verificación de la aproximación de un solo polo en la región exponencial (línea a cuadros) para la probabilidad de supervivencia (ecuación (5.14)) con (a)  $q = 2$  y (b)  $q = 5$ . Para poder comparar, se incluye el cálculo exacto (ecuación (5.19)) (línea sólida) calculada con 10 polos. Los parámetros del potencial son  $\lambda = 200$  y  $a = 1$ .



**FIGURA 5.14** Verificación de la aproximación de un solo polo en la región exponencial (línea a cuadros) para la probabilidad de no-escape (ecuación (5.15)) con (a)  $q = 2$  y (b)  $q = 5$ . Para poder comparar, se incluye el cálculo exacto (ecuación (5.20)) (línea sólida) calculada con 10 polos. Los parámetros del potencial son  $\lambda = 200$  y  $a = 1$ .

$V(r) = \lambda \delta(r - a)$  encontramos que

$$\phi_{in}(k, r') = \frac{\text{sen}(kr')}{k}, \quad (5.24)$$

$$f_{in}(k, r) = e^{ikr} - \frac{\lambda}{k} \text{sen } k(r - a) e^{ika} \quad (5.25)$$

y

$$W_{in}(k) = 1 + \frac{\lambda}{k} \text{sen}(ka) e^{ika}, \quad (5.26)$$

de modo que la función de Green saliente para la región interna es de la forma

$$G_{in}^+(r, r'; k) = -\frac{r' \frac{\text{sen}(kr')}{kr'} \left[ e^{ik(r-a)} - \lambda(r-a) \frac{\text{sen } k(r-a)}{k(r-a)} \right]}{\left[ e^{-ika} + \lambda a \frac{\text{sen}(ka)}{ka} \right]}. \quad (5.27)$$

A partir de la expresión anterior podemos obtener

$$\left[ \frac{\partial G_{in}^+(r, r'; k)}{\partial k} \right]_{k=0} = -\frac{irr'}{(1 + \lambda a)^2}. \quad (5.28)$$

Una vez que tenemos la forma explícita de la derivada de la función de Green saliente para la región interna, podemos evaluar la ecuación (5.22) y obtener que

$$\dot{C}(r, 0) = -\frac{irC(q)}{(1 + \lambda a)^2}. \quad (5.29)$$

donde

$$\begin{aligned} C(q) &\equiv \int_0^a \Psi(r', 0) r' dr' \\ &= -\frac{a\sqrt{2a}}{q\pi} \cos(q\pi) = -\frac{a\sqrt{2a}}{q\pi} (-1)^q. \end{aligned} \quad (5.30)$$

y, finalmente,

$$\Psi_{in}(r, t) = \alpha \dot{C}(r, 0) \left( \frac{1}{t^{3/2}} \right), \quad (5.31)$$

$$= -\frac{i\alpha C(q)}{(1 + \lambda a)^2} \left( \frac{r}{t^{3/2}} \right). \quad (5.32)$$

Hemos obtenido así la contribución en forma explícita de la función de onda para tiempos largos [60].

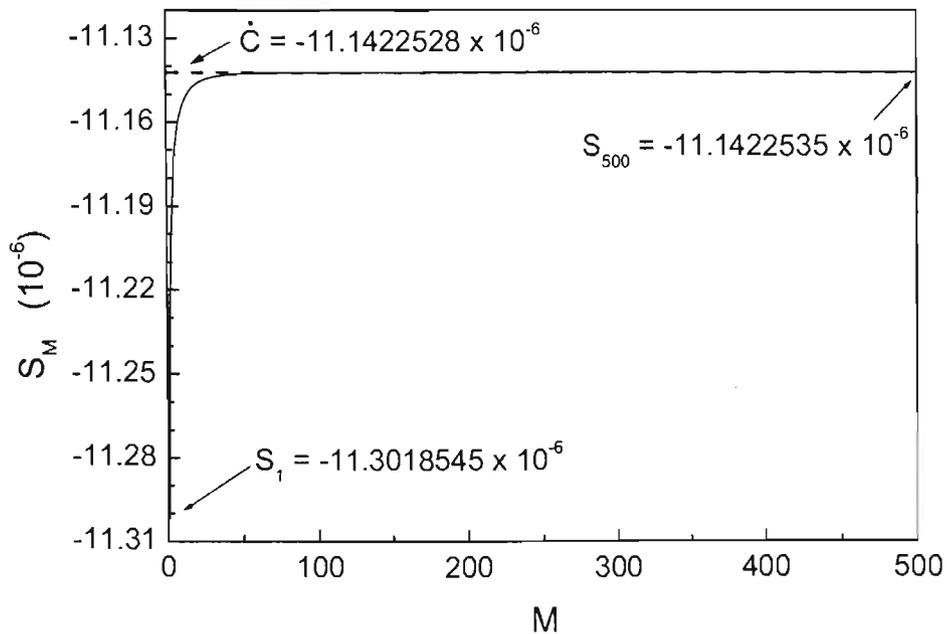
Comparando el coeficiente correspondiente al término  $t^{-3/2}$  de la ecuación (5.31) con el correspondiente de la expresión para la función de onda a tiempos largos obtenido en la subsección 5.2.1 (ecuación (5.12)) vemos que se debe de satisfacer la siguiente identidad

$$\dot{C}(r, 0) = -i \operatorname{Im} \left[ \sum_{m=1}^{\infty} \frac{C_m u_m(r)}{k_m^3} \right]. \quad (5.33)$$

En la Figura 5.15 mostramos la comparación entre ambos miembros de la ecuación (5.33) para el caso  $r = a$  y  $\lambda = 200$ . Esta figura nos muestra cómo la suma

$$S_M = -i \operatorname{Im} \left[ \sum_{m=1}^M \frac{C_m u_m(a)}{k_m^3} \right]$$

tiende al valor  $\dot{C}(a, 0)$  conforme aumentamos el número  $M$  de términos sumados, sugiriéndonos que la igualdad (5.33) se satisface al tender  $M$  a infinito.



**FIGURA 5.15** Verificación de la igualdad (5.33) correspondiente al coeficiente del término  $t^{-3/2}$  de la función de onda en  $r = a$ . La intensidad del potencial es  $\lambda = 200$ .

A partir de la ecuación (5.32) podemos encontrar que la contribución a tiempos largos para la probabilidad de supervivencia es igual a

$$S(t) = \frac{|\alpha|^2 C^4(q)}{(1 + \lambda a)^4} \left( \frac{1}{t^3} \right), \quad (5.34)$$

y la contribución a tiempos largos para la probabilidad de no-escape es igual a

$$P(t) = \frac{|\alpha|^2 a^3 C^2(q)}{3(1 + \lambda a)^4} \left( \frac{1}{t^3} \right). \quad (5.35)$$

Las expresiones para  $P(t)$  y  $S(t)$  permiten mostrar, mediante fórmulas simples, el comportamiento asintótico de  $t^{-3}$  para ambas cantidades.

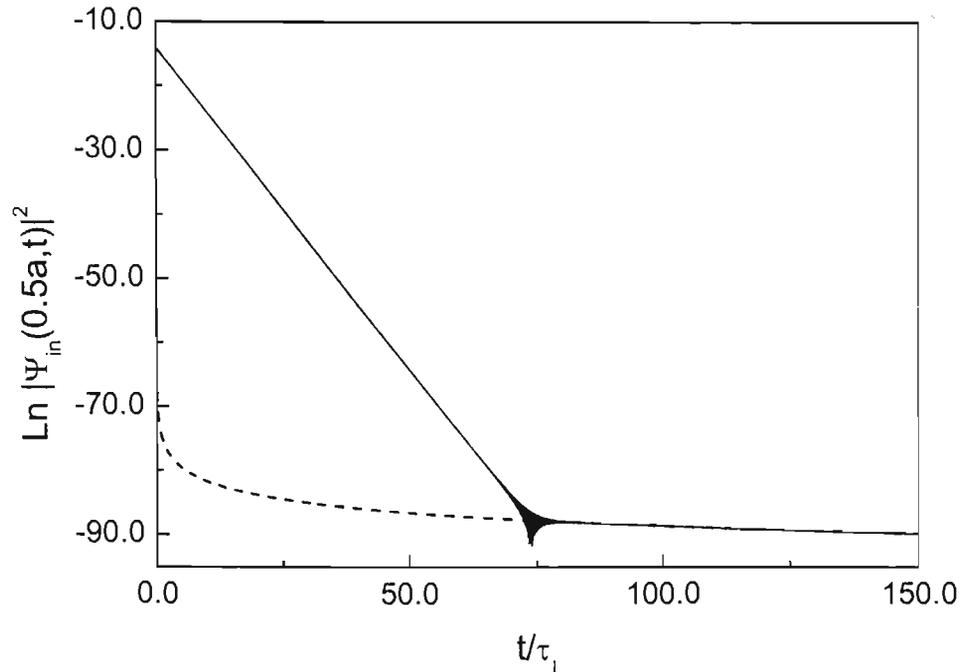
A continuación mostraremos la comparación de los cálculos utilizando el formalismo de polos y funciones resonantes con el cálculo donde se utiliza la forma explícita de la función de Green de la región interna.

En la Figura 5.16 hacemos la comparación entre ambas funciones de onda.

En la Figura 5.17 vemos la comparación entre ambos cálculos de la probabilidad de supervivencia.

Finalmente, en la Figura 5.18 presentamos la comparación entre ambas probabilidades de supervivencia.

En todos los cálculos se utilizaron los valores de  $\lambda = 200$  y  $q = 1$  y vemos que las curvas se traslapan completamente en la región de tiempos largos, mostrando de esta manera que el comportamiento correcto es el de  $t^{-3/2}$  para la función de onda y de  $t^{-3}$  para las probabilidades de supervivencia y de no-escape.



**FIGURA 5.16** Verificación del traslape entre la función de onda de la región interna (línea sólida) (ecuación (5.18)) y el cálculo a tiempos largos (línea a puntos) (ecuación (5.32)), para el caso  $r/a = 0.5$ ,  $\lambda = 5000$ ,  $a = 1$  y  $q = 1$ .

### 5.3 Cálculos en la Región Externa

A continuación presentaremos los resultados del estudio numérico realizado para explorar la dinámica de la función de onda de la región externa del potencial delta,  $\Psi_{ex}(r, t)$ , dada por la ecuación (4.17). En el tratamiento que hemos realizado hasta el momento, nos hemos enfocado en el estudio de las cantidades de interés en el régimen de decaimiento exponencial y de desviaciones a tiempos largos. Sin embargo, en el caso de la función de onda de la región externa es importante analizar primero su comportamiento en general antes de estudiar estos límites. Esto se debe a que, a diferencia de lo que sucede en la expresión para la región interna, en donde la dependencia temporal y la espacial son independientes una de la otra (ver ecuación (4.8)), en la función de onda de la región externa ambos comportamientos están determinados por la misma función, esto es, por la función  $M(x, q, t)$  (ver ecuación

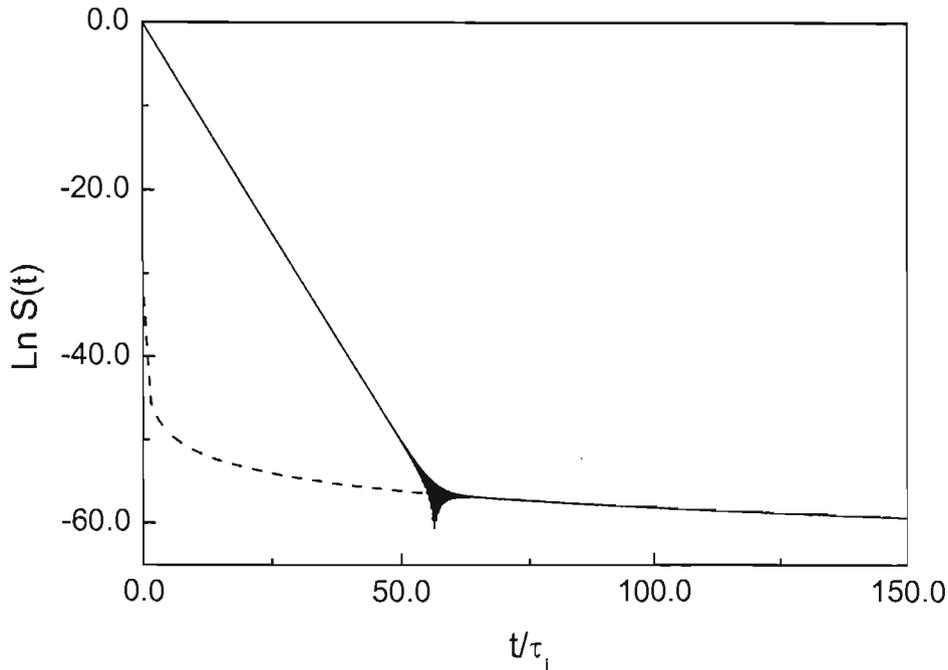


FIGURA 5.17 Verificación del traslape entre la probabilidad de supervivencia (línea sólida) (ecuación (5.14)) y el cálculo a tiempos largos (línea a puntos) (ecuación (5.34)), para el caso  $\lambda = 200$ ,  $a = 1$  y  $q = 1$ .

(4.17)). Esto necesariamente implica que debemos definir con precisión lo que significa tomar el “límite de tiempos largos”. Eso lo vislumbramos cuando utilizamos por primera vez el desarrollo asintótico de la función  $M(x, q, t)$  (ecuación (4.16)), en donde vimos que tratar con tiempos largos necesariamente implica considerar distancias pequeñas. Además, vimos que para poder cancelar exactamente la contribución de  $t^{-1/2}$  en la función de onda mediante la aplicación de la regla de suma, fue necesario considerar que el tiempo,  $t$ , fuese mucho menor que la escala de tiempo asociada al primer polo. Así pues, estas dos restricciones en el uso de los desarrollos asintóticos de las funciones  $M$ , limitan la región de validez de los mismos. En la subsección 4.3.1 realizamos un análisis general de la función de onda de la región externa para establecer las condiciones bajo las cuales se pueden considerar tiempos largos o distancias pequeñas y utilizar los desarrollos asintóticos de las funciones

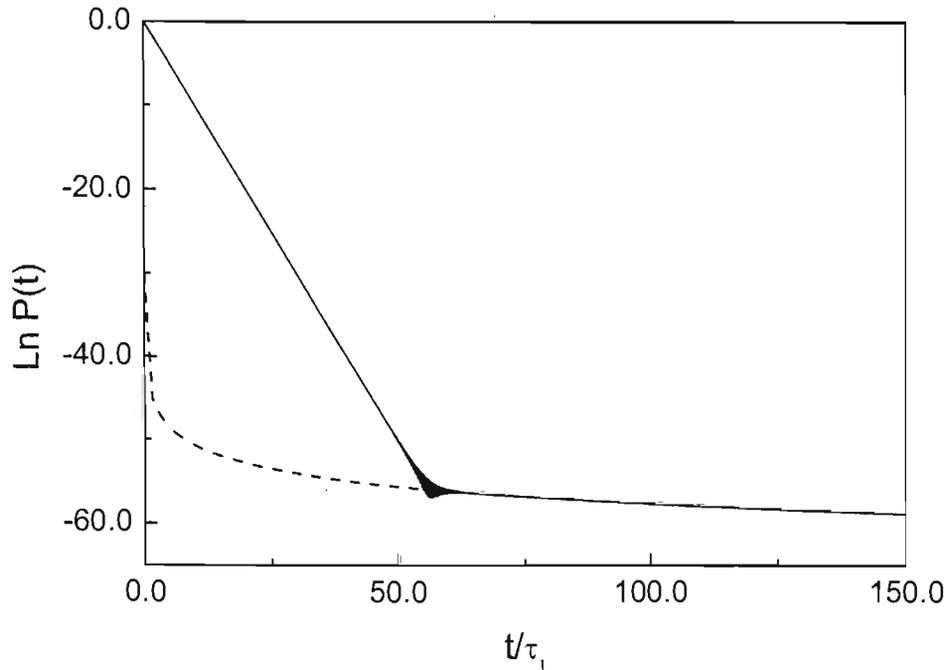


FIGURA 5.18 Verificación del traslape entre la probabilidad de no-escape (línea sólida) (ecuación (5.15)) y el cálculo a tiempos largos (línea a puntos) (ecuación (5.35)), para el caso  $\lambda = 200$ ,  $a = 1$  y  $q = 1$ .

$M$  involucradas.

Un resultado interesante que se desprende del estudio de  $\Psi_{ex}(r, t)$  como función de  $r$  y  $t$ , es la existencia de una estructura en la densidad de probabilidad a la cual llamamos frente de onda. Dicha estructura se manifiesta como un cambio en el comportamiento de  $\Psi_{ex}(r, t)$ . En la subsección 5.3.1 estableceremos un criterio basado en el análisis de dicho frente, mediante el cual será posible separar la dinámica de  $\Psi_{ex}(r, t)$ , tanto en su evolución temporal como en la espacial, en dos regímenes: *i*) como función de  $r$ , nos divide el régimen de distancias pequeñas y de crecimiento exponencial del régimen de distancias largas; *ii*) como función de  $t$ , nos divide el régimen de tiempos cortos del régimen de decaimiento exponencial y de tiempos largos. Este es un resultado importante si nuestro deseo es el de describir únicamente el régimen de decaimiento exponencial y de desviaciones a tiempos

largos. Propondremos una expresión para representar a dicho frente y veremos bajo qué condiciones se puede utilizar.

Una vez estudiado el comportamiento general de la función de onda, exploraremos el régimen de interés de nuestro estudio. En la subsección 5.3.2 presentamos la ecuación que define el régimen de tiempos largos (distancias pequeñas) y de decaimiento exponencial (crecimiento exponencial) como función del tiempo (de la posición) considerando siempre al frente de onda en los cálculos. Por último, en las subsecciones 5.3.3 y 5.3.4, en analogía a como hicimos en la región interna, presentamos la aproximación de un polo y la expresión asintótica para la función de onda que se obtiene con el método de la fase estacionaria.

### 5.3.1 Comportamiento general de la función de onda.

Realizaremos nuestro estudio de la función de onda de la región externa a partir de la ecuación (4.17) que reescribimos aquí:

$$\begin{aligned} \Psi_{ex}(r, t) &= \sum_{m=1}^{\infty} \left[ C_m u_m(a) e^{i(r-a)k_m} e^{-ik_m^2 t} \right] \\ &- \sum_{m=1}^{\infty} \left[ C_m u_m(a) M(a-r, -k_m, t) - C_m^* u_m^*(a) M(r-a, -k_m^*, t) \right]. \end{aligned} \quad (5.36)$$

Vemos que, además de la contribución exponencial al comportamiento de la función de onda, dada por el primer término del lado derecho de esta ecuación, tenemos contribuciones adicionales dadas por las funciones  $M$  involucradas en el desarrollo. Como hemos mencionado con anterioridad, estas funciones son las responsables de las desviaciones del comportamiento exponencial en los regímenes de tiempos cortos y de tiempos largos, o, equivalentemente, de distancias grandes y de distancias pequeñas.

Iniciamos nuestro estudio con el análisis de  $|\Psi_{ex}(r, t)|^2$  como función del tiempo en la frontera del sistema,  $r = a$ . En este caso, es de esperarse que tanto  $|\Psi_{ex}(r, t)|^2$  como  $|\Psi_{in}(r, t)|^2$  exhiban un comportamiento idéntico debido a la continuidad de las soluciones en  $r = a$ . En la Figura 5.19 ilustramos este caso para el sistema  $\lambda = 200$ ,  $a = 1$  y  $q = 1$ . Tal como lo anticipamos, las curvas correspondientes se traslapan. En este momento es importante destacar el siguiente punto. Mediante el uso de dos métodos distintos hemos encontrado que el comportamiento de la función de onda,  $|\Psi_{ex}(r, t)|^2$ , a tiempos largos va como  $t^{-3/2}$ ; ver ecuaciones (4.18) y (4.24) del capítulo 3. Uno de estos métodos, presentado

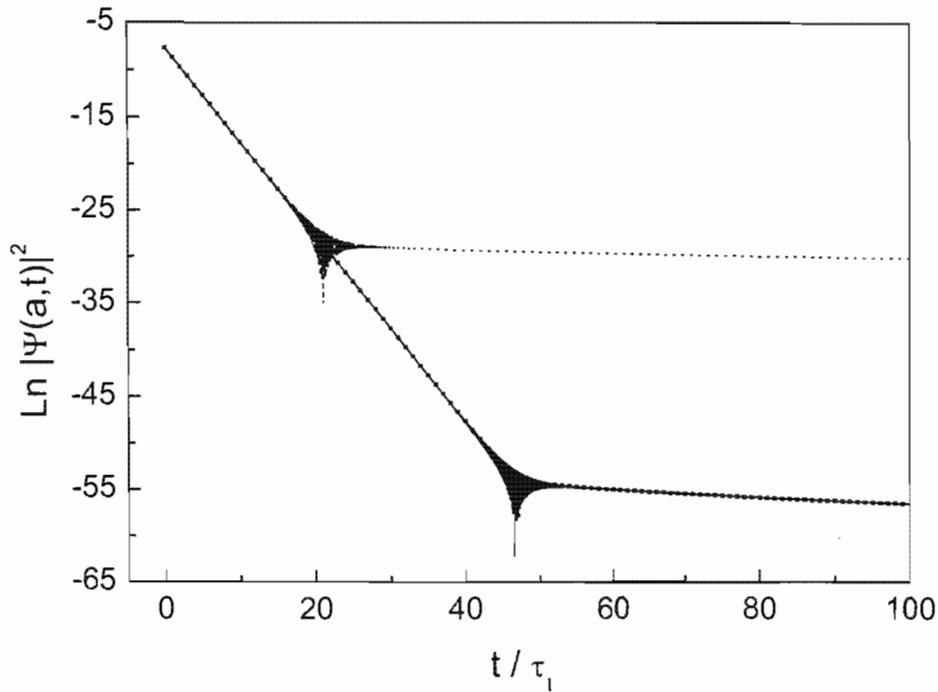


FIGURA 5.19 Comparación de la evolución temporal de  $|\Psi_{ex}|^2$  (línea a cuadros) (ecuación (5.36)) con  $|\Psi_{in}|^2$  (línea sólida) (ecuación (5.12)). Ambas curvas se traslapan. Se incluye el cálculo de  $|\Psi_{ex}|^2$  sin la eliminación del término  $t^{-1/2}$  (línea a puntos), lo que conduce a un resultado erróneo.

en la sección 3.2, involucró el desarrollo asintótico de la función  $M$  y de su suma sobre todos los polos,  $k_n$ , del sistema. Ahí encontramos que, al utilizar la regla de suma (2.27), la contribución  $t^{-1/2}$  se anula, dando como resultado el comportamiento  $t^{-3/2}$ . Aunque así demostramos analíticamente que el término  $t^{-1/2}$  se anula exactamente, al realizar el cálculo numérico de la función de onda mediante la ecuación (5.36), dicho término no lo hace. Para mostrar lo que sucede si no eliminamos explícitamente el término que va como  $t^{-1/2}$  de nuestros cálculos, hemos agregamos también a la Figura 5.19 el cálculo sin la eliminación de dicho término, en donde vemos que la función de onda resultante presenta un comportamiento erróneo. Es claro de la figura, que no se satisface la igualdad con la función de la región interna. La razón de este comportamiento es que la regla de suma que anula al término  $t^{-1/2}$  involucra una suma sobre un número infinito de polos resonantes

( $m = 1$  a  $\infty$ ) y, dado que en los cálculos numéricos necesariamente sumamos hasta cierto polo finito  $k_M$ , la suma no se anula. Aún más, esta contribución domina sobre el término que va como  $t^{-3/2}$  arrojando resultados erróneos. Es por esto que resulta crucial anular por nuestra cuenta dicha contribución.

Análogamente, al hacer cálculos de la función de onda con respecto a la posición,  $r$ , debemos tener en mente que el no eliminar explícitamente el término que va como  $t^{-1/2}$  de los cálculos a distancias pequeñas nos arrojará resultados erróneos. En la Figura 5.20 mostramos esta situación para el módulo de la función de onda<sup>3</sup>,  $|\Psi(r, t)|$ , como función de  $r$  en la vecindad de la frontera  $r = a$ .

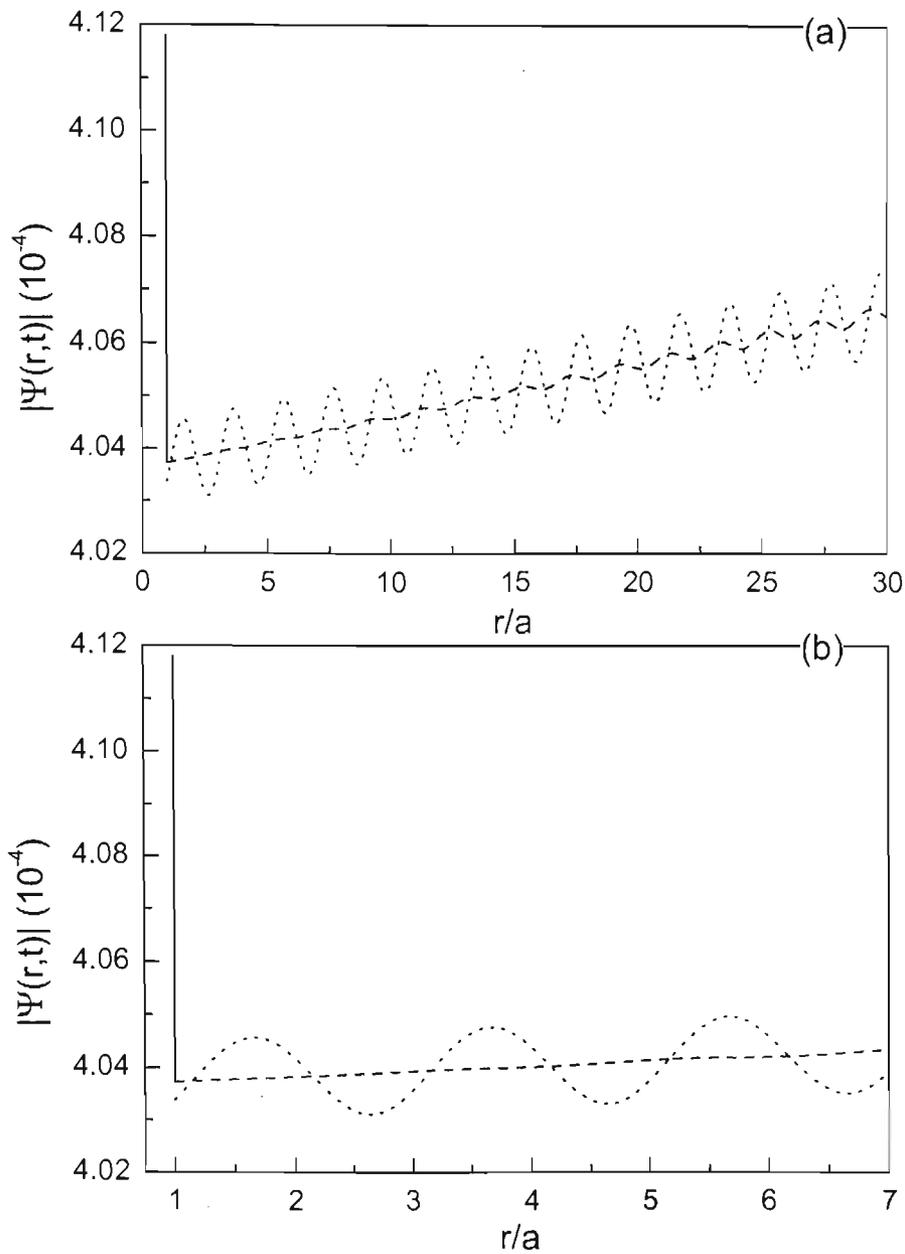
Una vez más, vemos claramente que si no eliminamos por nuestra cuenta el término de orden  $t^{-1/2}$ , entonces no se satisface la condición de continuidad de la función de onda en la frontera. Observemos además que el comportamiento erróneo exhibe oscilaciones de gran amplitud con respecto a la solución correcta.

Una vez aclarado el punto anterior, mostraremos el comportamiento general de la función de onda. En las Figuras 5.21, 5.22 y 5.23 mostramos la evolución de la densidad de probabilidad con respecto a la posición,  $r$ , para tres valores distintos del tiempo:  $t/\tau_1 = 10^{-2}$  vm,  $t/\tau_1 = 10^{-1}$  vm y  $t/\tau_3 = 8$  vm

Estas figuras muestran cómo la función de onda presenta un frente que avanza conforme aumenta el tiempo. Esta es una característica que proviene exclusivamente de las funciones  $M$ . Para contrastar con este resultado, graficamos también la contribución puramente exponencial a la función de onda, línea a trazos, y vemos que ésta, por sí sola, no reproduce dichos frentes. El término que va como  $t^{-3/2}$  tampoco es el responsable de dicho frente ya que en esa región no es aplicable el límite de distancias cortas. Con esto podemos concluir dos cosas: *i*) que el frente proviene del desarrollo de las funciones  $M$  a tiempos cortos (distancias largas) en donde ya no está presente el régimen exponencial y *ii*) que para considerar este frente en una expresión del tipo exponencial más desviaciones a tiempos largos (distancias pequeñas), deberemos agregarlo por nuestra cuenta. Es con este último propósito que procederemos a obtener una expresión que nos permita caracterizar al frente de onda, por lo menos bajo ciertas condiciones de la función de onda inicial. Ya hemos

---

<sup>3</sup>Presentamos el módulo de la función de onda (sin elevar al cuadrado) para que las diferencias entre ambos cálculos sean más evidentes.



**FIGURA 5.20** Evolución de  $|\Psi(r,t)|$  como función de  $r$  en la vecindad de la frontera  $r = a$ . Comparamos el caso  $|\Psi_{ex}(r,t)|$  (línea a trazos), en donde no se cancela el término  $t^{-1/2}$ , con la solución  $|\Psi_{ex}(r,t)|$  (línea a puntos) en donde hemos eliminado el término  $t^{-1/2}$ . Los parámetros utilizados son  $\lambda = 200$ ,  $a = 1$ ,  $q = 1$  y  $t/\tau_1 = 8$  vm. La gráfica (b) es una ampliación de la gráfica (a)

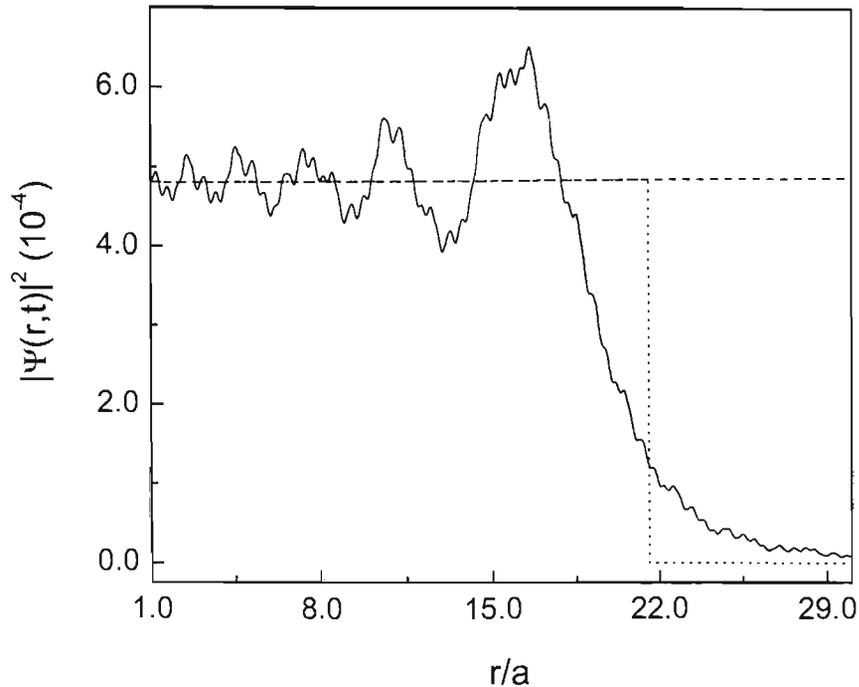
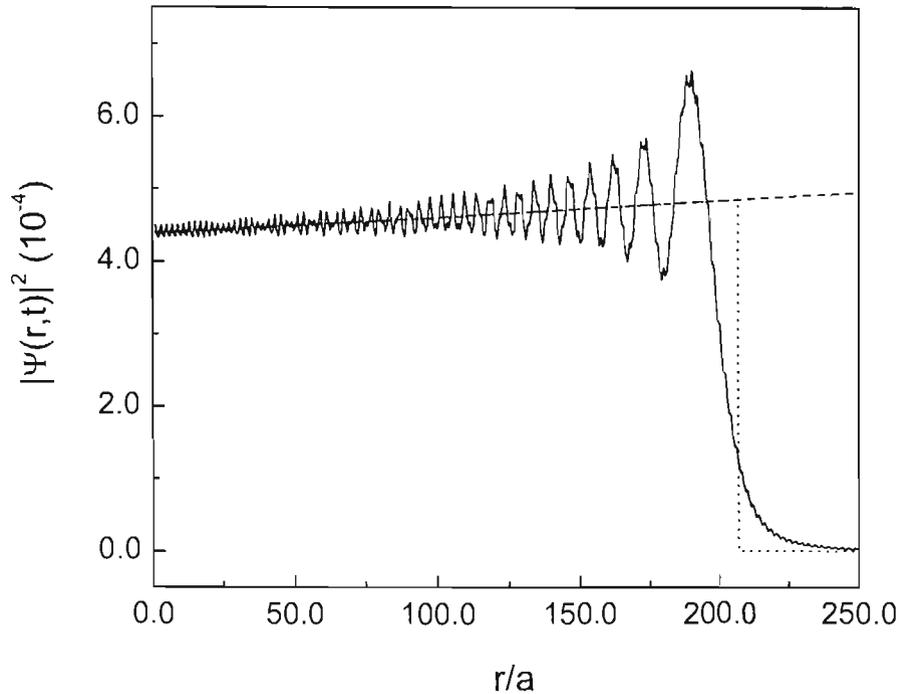


FIGURA 5.21 Densidad de probabilidad (línea sólida) como función de la posición para el sistema  $\lambda = 200$ ,  $a = 1$  y  $q = 1$  a un tiempo  $t/\tau_1 = 0.001$  vm. Como referencia se agrega el término puramente exponencial de la función de onda (línea a trazos) y el frente de onda (línea a puntos).

visto que, cuando el estado inicial se asemeja al primer estado resonante ( $q=1$ ), el régimen de decaimiento exponencial puede ser descrito completamente por el término exponencial debido al primer polo resonante,  $k_1 = \alpha_1 - i\beta_1$ . Utilizando esta misma idea, supondremos que el frente de onda queda también descrito por este primer polo y proponemos que su posición a un cierto tiempo está determinada por una relación del tipo:  $x = v_1 t$ , en donde aún debemos determinar la velocidad  $v_1$ . Si observamos con cuidado el módulo cuadrado de la exponencial debida al primer polo resonante:

$$|e^{ik_1 x} e^{-ik_1^2 t}|^2 = e^{2\beta_1(r-a)} e^{-4\alpha_1\beta_1 t}, \quad (5.37)$$

podemos notar que, para un valor específico de la posición,  $r$ , existe un valor del tiempo,  $t$ , en donde el exponente se anula. Este par de valores está dado por la relación  $(r - a) = 2\alpha_1 t$ ,



**FIGURA 5.22** Densidad de probabilidad (línea sólida) como función de la posición para el sistema de la Figura 5.21 sólo que a un tiempo  $t/\tau_1 = 0.01$  vm. Como referencia se agrega el término puramente exponencial de la función de onda (línea a trazos) y el frente de onda (línea a puntos).

relación que tiene la forma  $x = v_1 t$ . Proponemos entonces que el frente de la función de onda viaja en el espacio con una velocidad dada por  $2\alpha_1$  y que este frente nos separa a la función de onda en dos regiones: una que contiene a las contribuciones exponencial y de desviaciones a tiempos largos (o distancias pequeñas) y la otra que contiene a las desviaciones a tiempos cortos (o distancias grandes). Recordemos que esta suposición es solamente válida para el caso en que el estado inicial se asemeja al primer estado resonante. Para comprobar la validez de esta suposición hemos graficado en las Figuras 5.21, 5.22 y 5.23 la contribución exponencial debida al primer polo pero cortada a partir del valor en donde  $(r - a) = 2\alpha_1 t_0$ , en donde  $t_0$  es el valor del tiempo para cada gráfica en particular. Conforme  $t$  aumenta, observamos que la amplitud del frente crece en forma exponencial.

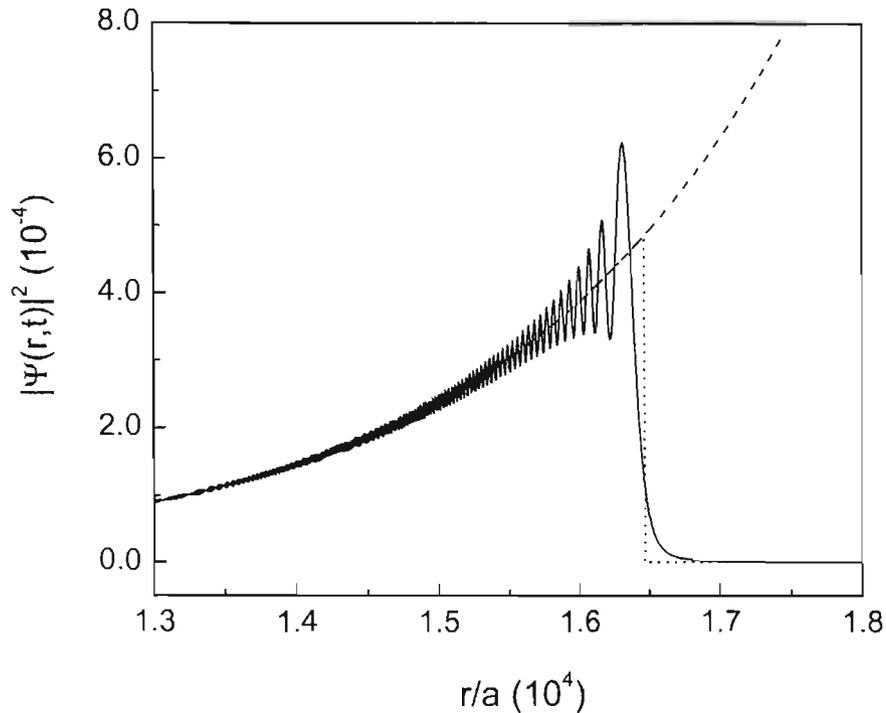


FIGURA 5.23 Densidad de probabilidad (línea sólida) como función de la posición para el sistema de la Figura 5.21 sólo que a un tiempo  $t/\tau_1 = 8$  vm. Como referencia se agrega el término puramente exponencial de la función de onda (línea a trazos) y el frente de onda (línea a puntos).

Para estos valores grandes de  $t$  observamos que  $|\Psi_{ex}|^2$  reproduce razonablemente para  $r$  pequeña el comportamiento exponencial típico de  $|u_1(r)|^2$  en la región externa.

En forma análoga a como sucede para un tiempo fijo  $t_0$ , cuando graficamos a la función de onda en el tiempo para una posición fija  $r_0$ , ésta presenta un frente en  $t = (r_0 - a)/2a_1$ , antes del cual se encuentran las desviaciones a tiempos cortos y después del cual se encuentran las contribuciones exponencial y de desviaciones a tiempos largos. Debido a que el frente que se propaga en  $r$  es muy pronunciado (ver Figura 5.23), es de esperarse que en la evolución temporal de  $|\Psi_{ex}|^2$ , éste se manifieste también con un cambio abrupto en la densidad de probabilidad. Esto se puede apreciar en la Figura 5.24 en donde graficamos la probabilidad como función del tiempo para un valor fijo de la posición  $r/a =$

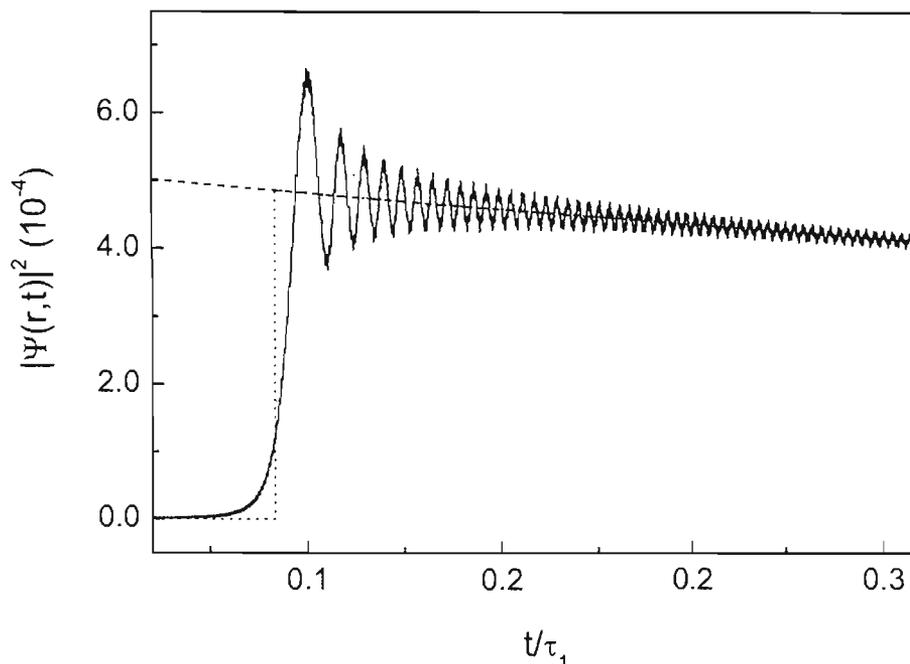


FIGURA 5.24 Densidad de probabilidad (línea sólida) como función del tiempo para el sistema  $\lambda = 200$ ,  $a = 1$  y  $q = 1$  en una posición  $r/a = 189.9$ . Como referencia, se agrega el término puramente exponencial de la función de onda (línea a trazos) y el frente de onda (línea a puntos). Nótese que el máximo de la función de onda ocurre aproximadamente en los mismos valores  $(r/a, t/\tau_1)$  que en la Figura 5.22

189.9. Esta gráfica nos proporciona aún más información: Observando el máximo del frente de onda, notaremos que éste ocurre a un valor cercano de  $t/\tau_1 = 0.1$  vm (recordemos que el cálculo se hizo con un valor de  $r/a = 189.9$ ).

Similarmente, en la Figura 5.22, en donde el valor del tiempo es  $t/\tau_1 = 0.1$  vm, vemos que el máximo ocurre a un valor aproximado de  $r/a = 190$ . Esto nos indica que la aparición del máximo de la probabilidad como función de la posición se corresponde con la aparición del máximo de la misma como función del tiempo. Este comportamiento se puede explicar a partir de nuestra fórmula aproximada de aparición del frente de onda:  $(r - a) - 2\alpha_1 t = 0$ , en donde se relaciona  $r$  con  $t$  y viceversa.

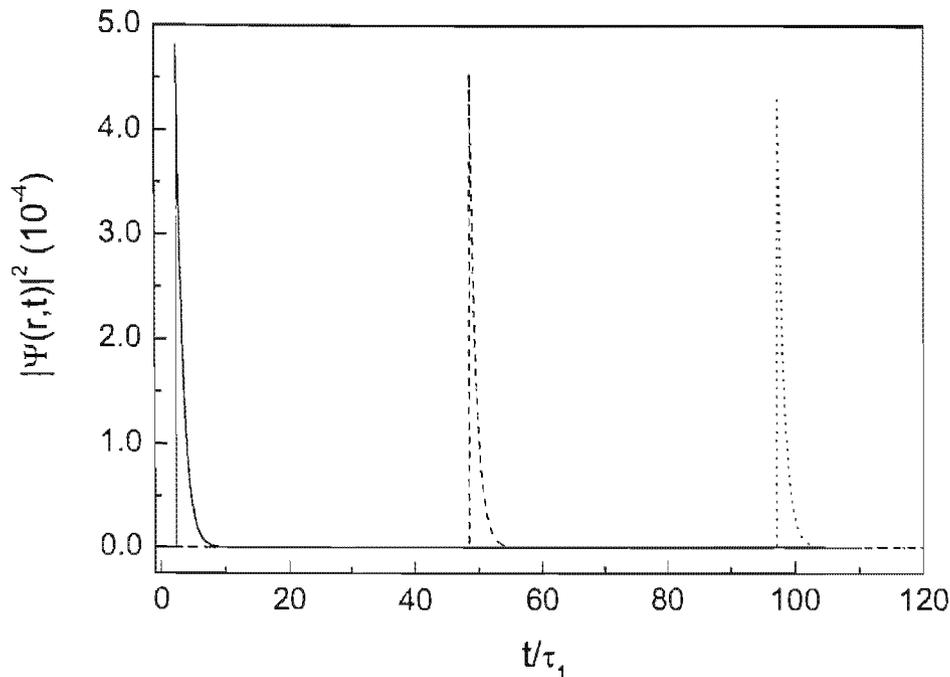
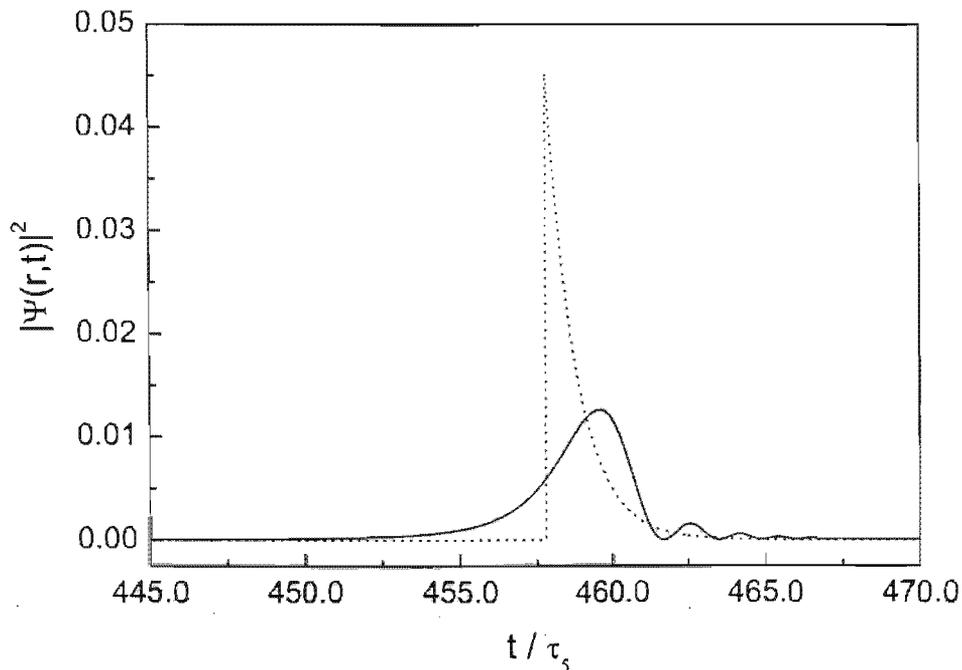


FIGURA 5.25 Densidad de probabilidad como función del tiempo para tres valores distintos de la posición:  $r/a = 5000$  (línea sólida),  $r/a = 10^5$  (línea a trazos) y  $r/a = 2 \times 10^5$  (línea a puntos). Los parámetros del sistema son  $\lambda = 200$ ,  $a = 1$  y  $q = 1$ . Los cálculos se realizaron con 10 polos.

En la Figura 5.25 se ilustra el paso del frente de onda a través de distintos valores de la posición. Notemos que entre más lejos estamos, el máximo del frente es cada vez menor. Éste es un comportamiento completamente contrario a lo observado en los cálculos con respecto a la posición, en donde a tiempos cada vez mayores, el máximo del frente es también cada vez mayor (ver Figuras 5.21 a 5.23). Esto también puede ser explicado con la parte exponencial de la función de onda, en donde vemos que su módulo decrece con el tiempo mientras que aumenta con la posición.

En el caso en que la condición inicial sea tal que se parezca más al  $n$ -ésimo estado resonante ( $q = n$ ), entonces, en lugar de que el frente de onda esté determinado por el primer polo, lo estará por el  $n$ -ésimo polo. Un ejemplo de esta situación se ilustra en la

Figura 5.26 para el caso en que el estado inicial se parece al quinto estado resonante ( $q = 5$ ). Como podemos ver, aunque la posición del frente está razonablemente localizada, tanto la magnitud de la probabilidad como su anchura ya no están siendo bien caracterizadas. Es por esta razón que, en los cálculos que realicemos con la fórmula para tiempos largos y de decaimiento exponencial modulada por el frente definido aquí, nos restringiremos a los casos en donde  $q = 1$ .



**FIGURA 5.26** Densidad de probabilidad como función del tiempo (línea sólida) para un valor de  $q = 5$ . El valor de la posición es  $r/a = 10,000$ . Además, se agrega nuestra aproximación del frente de onda (línea a puntos). Como podemos ver, el frente de onda ya no caracteriza correctamente a la forma general de la probabilidad. Los parámetros del sistema son  $\lambda = 100$  y  $a = 1$ . Los cálculos se realizaron con 10 polos.

### 5.3.2 Comportamiento exponencial de la función de onda y sus desviaciones a tiempos largos o distancias pequeñas.

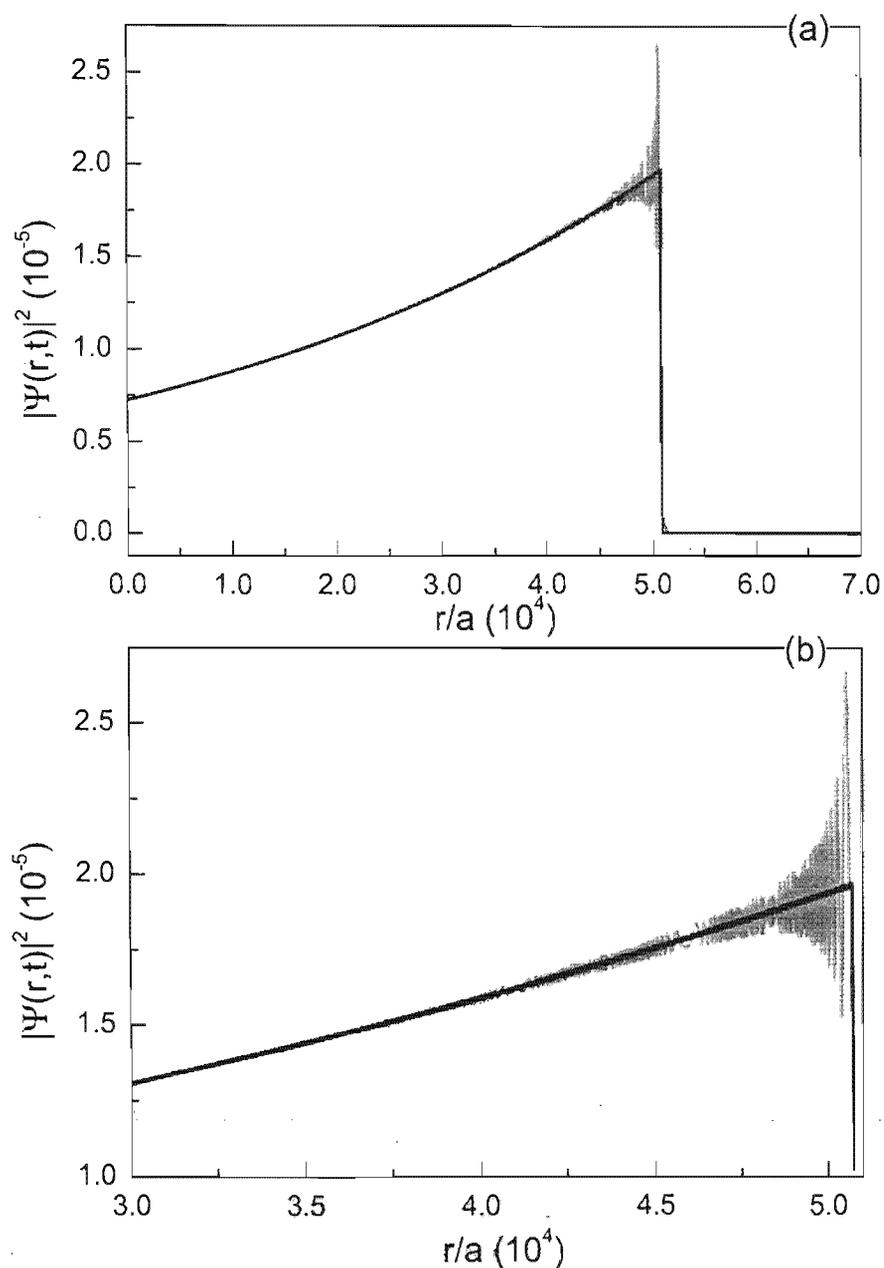
Una vez que hemos encontrado la forma de describir la propagación del frente de la función de onda en el tiempo y en la posición, procederemos a escribir una expresión para dicha función que incluya únicamente las contribuciones exponencial y la de desviaciones a tiempos largos (distancias pequeñas). Nos restringiremos al caso en donde la condición inicial se asemeja al primer estado resonante ( $q = 1$ ). En forma análoga al análisis para la región interna, escribiremos a la función de onda de la región externa en dos partes: (i) la contribución exponencial y (ii) la contribución no-exponencial que proviene del desarrollo asintótico de las funciones  $M$  involucradas, esto es,

$$\begin{aligned} \Psi_{ex}^{ap}(r, t) = & \Theta[2\alpha_1 t - (r - a)] \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} [C_m u_m(a) e^{i(r-a)k_m} e^{-ik_m^2 t}] \right. \\ & \left. - i\alpha \left[ (r - a) \operatorname{Re} \left( \sum_{m=1}^{\infty} \frac{C_m u_m(a)}{k_m^2} \right) + \operatorname{Im} \left( \sum_{m=1}^{\infty} \frac{C_m u_m(a)}{k_m^3} \right) \right] \left( \frac{1}{t^{3/2}} \right) \right\}, \quad (5.38) \end{aligned}$$

en donde la función de Heaviside,  $\Theta[2\alpha_1 t - (r - a)]$ , es la que caracteriza al frente de onda dada la condición inicial (5.2) y  $\alpha = e^{-i\pi/4}/2\sqrt{\pi}$ . Hemos agregado el superíndice  $ap$  a la función de onda para indicar que se trata una aproximación en lo que se refiere a la localización del frente de onda. En la Figura 5.27 se muestra el comportamiento de la función de onda con respecto a la posición,  $r$ , para el caso de  $\lambda = 1000$  a un tiempo  $t/\tau_1 = 1$  y su aproximación mediante el uso de la ecuación (5.38). Vemos que la aproximación es satisfactoria en la región de distancias pequeñas y en la localización del frente de onda. Las oscilaciones que aparecen antes de decaer la probabilidad no son reproducidas exactamente porque en el cálculo de desviaciones a distancias cortas estamos utilizando sólo la contribución de orden de  $t^{-3/2}$  y estamos despreciando todos los demás órdenes:  $t^{-5/2}$ ,  $t^{-7/2}$ , .... De incluirlos, debemos obtener esas oscilaciones.

En la Figura 5.28 se muestra el comportamiento de la función de onda con respecto al tiempo,  $t$ , para el caso de  $\lambda = 100$  en una posición  $r/a = 5000$  y su aproximación mediante el uso de la ecuación (5.38). Vemos que la aproximación también es satisfactoria.

Recordemos que nuestro interés en el presente trabajo es describir el comportamiento exponencial y las desviaciones de éste a tiempos largos. En la Figura 5.29 mostramos la misma comparación que en la Figura 5.28 pero ahora graficando el logaritmo natural de la densidad de probabilidad y a un intervalo mucho mayor del tiempo. Notamos que así, la



**FIGURA 5.27** Densidad de probabilidad con respecto a la posición (línea gris) a un tiempo  $t/\tau_1 = 1$   $\mu\text{m}$ , y su aproximación (línea negra) mediante el uso de la ecuación (5.38). (a) Se presenta cómo la aproximación reproduce el frente de onda. (b) Se muestra cómo la aproximación reproduce mejor las oscilaciones de la región exponencial y de distancias cortas cuando  $r$  es menor. Los parámetros del sistema son  $\lambda = 1000$ ,  $a = 1$  y  $q = 1$ .

aproximación dada por la ecuación (5.38) es excelente para describir el comportamiento del régimen de decaimiento exponencial y de tiempos largos. En la Figura 5.28, notamos una mayor discrepancia debido a que estamos graficando justo en donde se encuentra la transición del régimen de tiempos cortos al régimen de decaimiento exponencial. Sin embargo, al observar en un intervalo mayor de tiempo, notamos que esas discrepancias realmente no son de importancia, por lo que podemos utilizar nuestra aproximación para describir este régimen.

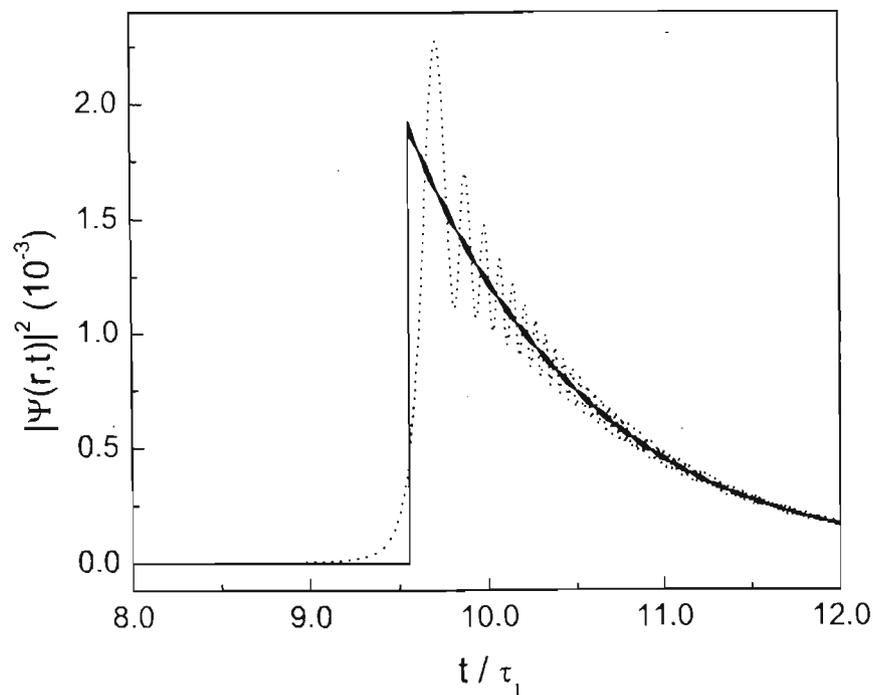


FIGURA 5.28 Densidad de probabilidad con respecto al tiempo (línea a puntos) en una posición  $r/a = 5000$ , y su aproximación (línea sólida) mediante el uso de la ecuación (5.38). Los parámetros del sistema son  $\lambda = 100$ ,  $a = 1$  y  $q = 1$ .

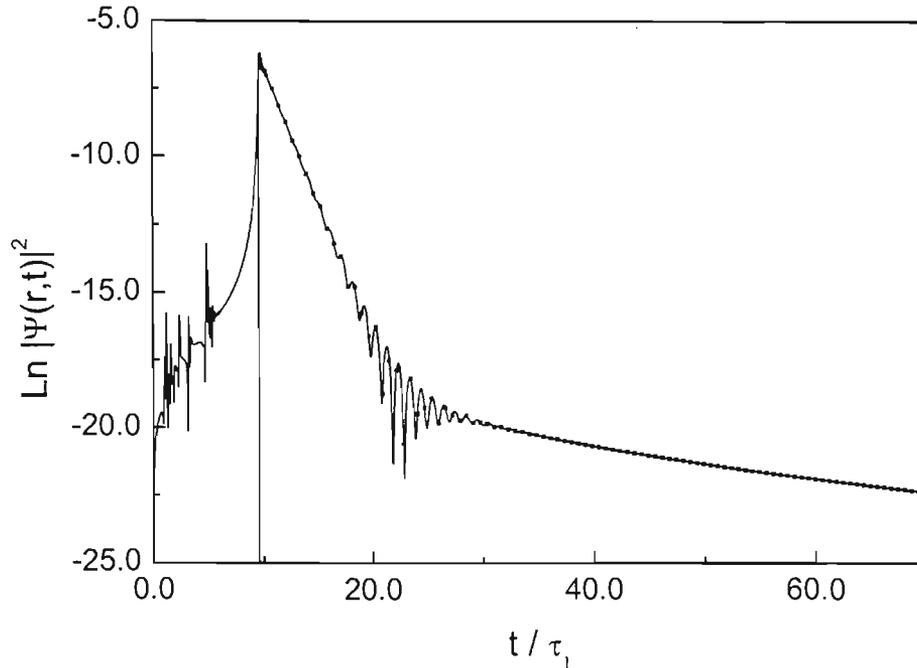


FIGURA 5.29 Logaritmo de la densidad de probabilidad con respecto al tiempo (línea sólida) y su aproximación mediante el uso de la ecuación (5.38) (línea a cuadros). Los parámetros del sistema son los mismos que los de la Figura 5.28.

### 5.3.3 La aproximación de un solo polo

Al igual que en la región interna, podemos aplicar la aproximación de un solo polo en la expresión aproximada para la función de onda de la región exponencial y de tiempos largos (ecuación(5.38)) para obtener

$$\Psi_{ex}(r,t) = \Theta[2\alpha_1 t - (r - a)] \left\{ C_1 u_1(a) e^{i(r-a)k_1} e^{-ik_1^2 t} - i\alpha \left[ (r - a) \operatorname{Re} \left( \sum_{m=1}^{\infty} \frac{C_m u_m(a)}{k_m^2} \right) + \operatorname{Im} \left( \sum_{m=1}^{\infty} \frac{C_m u_m(a)}{k_m^3} \right) \right] \left( \frac{1}{t^{3/2}} \right) \right\} \quad (5.39)$$

en donde nuevamente, restringiremos los cálculos para los casos en donde  $q = 1$  ya que para  $q > 1$  estas ecuaciones no son buenas aproximaciones.

En la Figura 5.30 presentamos el comportamiento de la función de onda con respecto

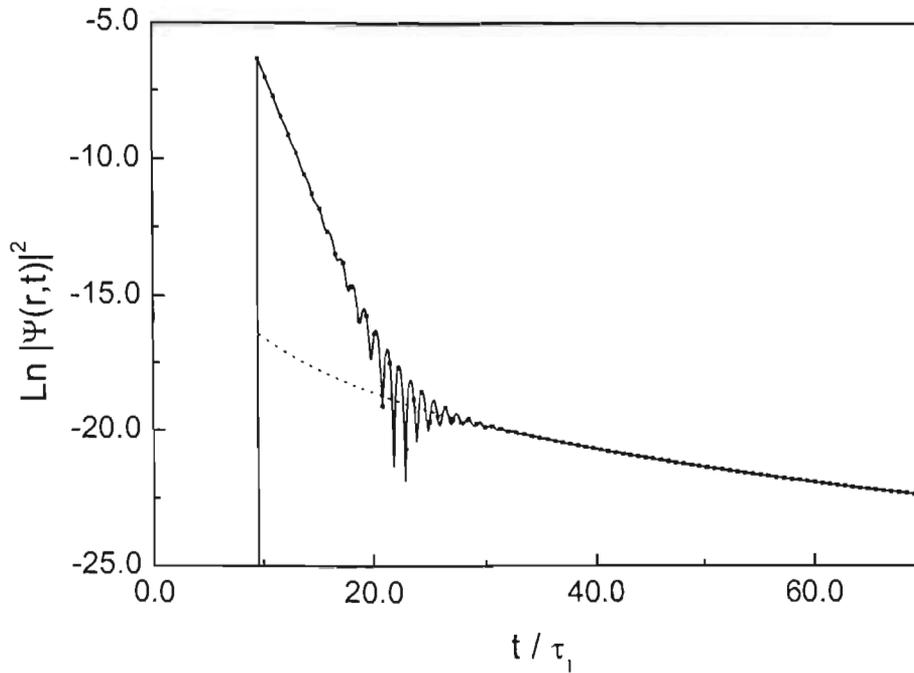


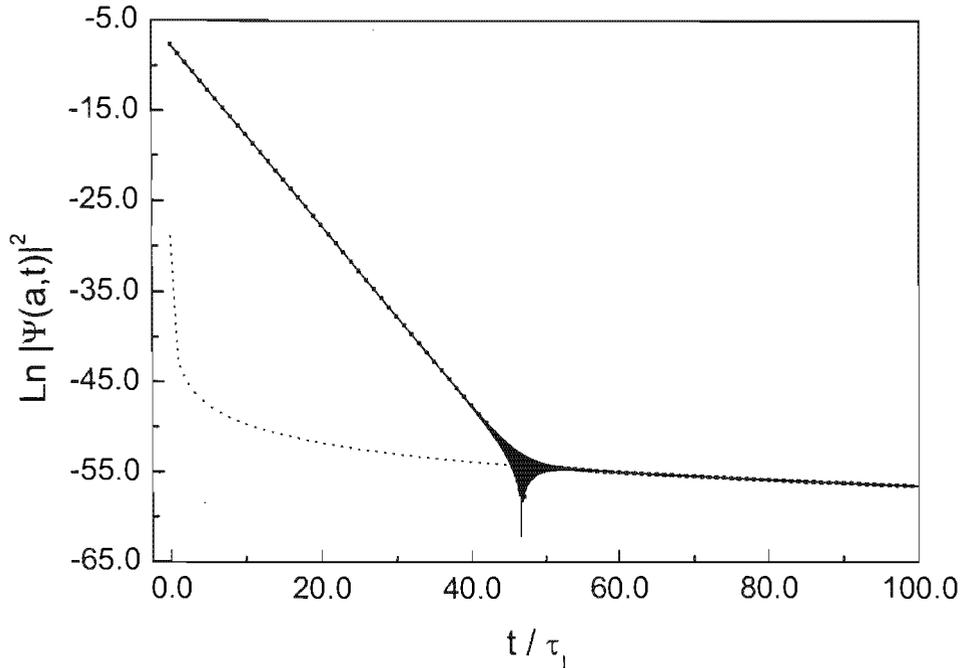
FIGURA 5.30 Logaritmo de la densidad de probabilidad en el régimen de decaimiento exponencial y de desviaciones a tiempos largos (línea sólida) y su aproximación de un solo polo (línea a cuadros) (ecuación (5.39)). Además, se incluye el comportamiento asintótico a tiempos largos (línea a puntos) (ecuación (5.42)). Los parámetros del sistema son los mismos que los de la Figura 5.28.

al tiempo,  $t$ , para el caso de  $\lambda = 100$  en una posición  $r/a = 5000$  y su aproximación de un solo polo, calculada mediante el uso de la ecuación (5.39). Vemos que la aproximación es bastante buena.

### 5.3.4 El método de la fase estacionaria

Para encontrar la función de Green saliente de la región externa aprovecharemos la relación que obtuvimos en el capítulo 3 entre ésta y la función de Green saliente de la región interna, ecuación (3.4):

$$G_{ex}^+(r, r'; k) = G_{in}^+(a, r'; k) e^{ik(r-a)}. \quad (5.40)$$



**FIGURA 5.31** Densidad de probabilidad calculada a partir de la ecuación (5.12) para la función de onda de la región interna evaluada en  $r = a$  (línea sólida) comparada con la aproximación de un solo polo calculada a partir de la ecuación (5.38) para la región externa, también evaluada en  $r = a$  (línea a cuadros). Además, se incluye el comportamiento a tiempos largos para la región externa (ecuación (5.42)) (línea a puntos). Los parámetros del sistema son los mismos que los de la Figura 5.19.

Derivando la ecuación anterior con respecto a  $k$  y evaluando en  $k = 0$  obtenemos que

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial G_{ex}^+(r, r'; k)}{\partial k} \right]_{k=0} &= i(r-a)G_{in}^+(a, r'; 0) + \left[ \frac{\partial G_{in}^+(r, r'; k)}{\partial k} \right]_{k=0} \\ &= -\frac{i[r + \lambda ar - \lambda a^2]r'}{(1 + \lambda a)^2}. \end{aligned} \quad (5.41)$$

De modo que, para la región externa

$$\Psi_{ex}(r, t) = -\frac{i \alpha \mathcal{C}(q)}{(1 + \lambda a)^2} \left( \frac{r + \lambda ar - \lambda a^2}{t^{3/2}} \right), \quad (5.42)$$

donde nuevamente aparece el coeficiente  $\mathcal{C}(q)$  definido por la ecuación (5.30):

$$\mathcal{C}(q) = -\frac{a\sqrt{2a}}{q\pi} (-1)^q. \quad (5.43)$$

En las Figuras 5.30 y 5.31 mostramos este límite asintótico y vemos que en ambos casos la densidad de probabilidad lo satisface. En especial, en la Figura 5.31, en donde hacemos el cálculo en  $r = a$ , corroboramos que, para que se satisfaga el límite asintótico, es de suma importancia eliminar por nuestra cuenta el término  $t^{-1/2}$  de las funciones  $M$  como ya se discutió en la sección 5.3.1.

## Capítulo 6

### CONCLUSIONES

En este trabajo se realizó, desde una perspectiva general, el estudio del problema de decaimiento de estados cuánticos arbitrarios confinados inicialmente en potenciales radiales de alcance finito. Este estudio se realizó mediante un formalismo que permite analizar la dinámica de la función de onda con base en expresiones analíticas exactas.

Entre las aportaciones más importantes de esta investigación se encuentra el desarrollo de nuevas herramientas teóricas para explorar los aspectos dinámicos del decaimiento cuántico. Entre éstas se destaca la obtención de una expresión analítica para la función de onda dependiente del tiempo en la región externa del potencial,  $\Psi_{ex}(r, t)$ , así como el desarrollo de diversas fórmulas asintóticas para describir a la función de onda en los diversos regímenes espaciales y temporales de interés. A continuación presentaremos una ampliación del contenido de estas aportaciones, así como de los resultados que se desprenden de nuestro estudio del decaimiento en la región interna y en la región externa del potencial.

Con la finalidad de estudiar el decaimiento de un estado cuántico  $\Psi(r, t = 0)$ , se utilizó un formalismo basado en el desarrollo de la función de onda dependiente del tiempo,  $\Psi(r, t)$ , en términos de estados resonantes. Dicho formalismo fue desarrollado originalmente por García-Calderón (1976) y ofrece una gran ventaja sobre algunos otros enfoques desarrollados en el contexto de la mecánica cuántica ortodoxa. Esto se debe en gran medida a que permite analizar por separado, y con base en expresiones analíticas exactas, las contribuciones exponenciales y no-exponenciales en el proceso de decaimiento. La solución completa del problema involucra el conjunto completo de polos y de estados resonantes asociados a la función de Green saliente del sistema.

En el presente trabajo se obtuvieron desarrollos asintóticos de la función de onda  $\Psi(r, t)$ , válidos en la región interna y externa del potencial a cualquier tiempo,  $t$ . Dichas expresiones se obtuvieron aplicando las propiedades de las funciones  $M$ , las cuales poseen desarrollos

asintóticos en potencias inversas de  $t$  para valores grandes de su argumento. Con base en estos desarrollos se obtuvieron expresiones analíticas para describir la evolución temporal de  $\Psi(r, t)$  en el régimen de tiempos largos. En particular, esto nos permitió demostrar que el comportamiento de la función de onda en este régimen temporal es proporcional a  $t^{-3/2}$ . Una conclusión importante que se desprende inmediatamente del resultado anterior, es que tanto la probabilidad de no-escape,  $P(t)$ , como la probabilidad de supervivencia,  $S(t)$ , se comportan en el tiempo como  $t^{-3}$ .

Otra de las aportaciones relevantes de nuestro estudio fue el desarrollo de una expresión equivalente, en el régimen de tiempos largos, para la función de onda de las regiones interna y externa del potencial. Esta expresión fue obtenida aplicando el método de la fase estacionaria a la forma integral del propagador del sistema, ya sea de la región interna o externa, para obtener la contribución dominante en la región de interés. A partir de la expresión de la función de onda obtenida por este método, se derivaron nuevas expresiones tanto para la probabilidad de supervivencia como para la probabilidad de no-escape obteniendo nuevamente el comportamiento  $t^{-3}$ . Estas expresiones representan un resultado general para el decaimiento de las ondas S de estados inicialmente confinados en la región interna de un potencial radial de alcance finito. Finalmente, este método fue utilizado para corroborar la validez de nuestros resultados obtenidos utilizando el formalismo de estados resonantes para tiempos largos.

Para verificar las diversas expresiones analíticas desarrolladas para la descripción de la dinámica de la función de onda, realizamos un estudio numérico del decaimiento en la región interna y externa del potencial. Para esto calculamos la función de onda de la región interna,  $\Psi_{in}(r, t)$ , y las cantidades asociadas a ésta como lo son la probabilidad de supervivencia,  $S(t)$ , y la probabilidad de no-escape,  $P(t)$ , y posteriormente estudiamos la función de onda de la región externa,  $\Psi_{ex}(r, t)$ . Es importante destacar que sólo nos enfocamos al estudio de los procesos de decaimiento en resonancia, *i.e.*, al estudio de situaciones en donde la energía del estado inicial es muy cercana a una de las energías de resonancia del sistema. Para ilustrar este enfoque teórico se utilizó un potencial delta de Dirac de intensidad  $\lambda$  y de radio  $r = a$ , dado por  $V(r) = \lambda\delta(r - a)$  y un estado inicial normalizado descrito por  $\Psi(r, t = 0) = (2/a)^{1/2} \text{sen}(q\pi r/a)$ , donde  $(q = 1, 2, 3, \dots)$ . En el estudio numérico verificamos la excelente descripción que brindan las distintas expresiones analíticas al analizar el comportamiento

de las cantidades  $\Psi_{in}(r, t)$ ,  $S(t)$ ,  $P(t)$  y  $\Psi_{ex}(r, t)$ . Las expresiones asintóticas también fueron verificadas en situaciones donde el decaimiento ocurre vía estados cuánticos cuyas energías son cercanas a las de resonancias de orden superior, *i.e.*,  $q > 1$ . En otras palabras, podemos afirmar que el comportamiento es válido para toda  $q$ . En el caso de decaimiento resonante, verificamos que el estado cuántico que decae, pierde memoria de su configuración inicial, ya que en el régimen de decaimiento exponencial, el comportamiento de  $\Psi(r, t)$  está invariablemente gobernado por el primer polo resonante.

Otro de los aspectos que abordamos en el presente trabajo fue el estudio de la dinámica de la función de onda,  $\Psi_{ex}(r, t)$ , en la región externa del potencial,  $r \geq a$ . Para esto obtuvimos una expresión analítica para la función de onda en términos de los polos y de los estados resonantes asociados a la función de Green saliente del sistema. El método mediante el cual obtuvimos la solución se discute con detalle en el capítulo 3 y es otra de las aportaciones importantes de esta investigación. De igual forma que en el caso de la región interna, obtuvimos expresiones asintóticas para la función de onda, y a partir de éstas obtuvimos expresiones analíticas para describir el régimen de tiempos largos.

Si bien es cierto que utilizando los desarrollos asintóticos de las funciones  $M$  hemos logrado describir el comportamiento correcto a tiempos largos de la función de onda y de sus cantidades asociadas, es importante señalar que estos resultados también pueden ser obtenidos al hacer los cálculos directamente con las funciones  $M$  involucradas, siempre y cuando se tomen las siguientes precauciones: En nuestro estudio demostramos formalmente que, a partir de las propiedades de las funciones  $M$  y de las llamadas reglas de suma, las contribuciones de la forma  $t^{-1/2}$  en  $\Psi$  se anulan exactamente. Es por esta razón que para poder evaluar numéricamente en forma correcta a la función de onda  $\Psi(r, t)$ , tanto de la región interna como de la externa, es necesario omitir las contribuciones  $t^{-1/2}$  en los desarrollos de las funciones  $M$ . De lo contrario, si ignoramos este tipo de modificaciones en la solución, inevitablemente obtendremos resultados erróneos. Esto es una consecuencia de que en el cálculo numérico de  $\Psi(r, t)$  sólo se considera un número finito (no infinito) de términos.

Es importante destacar que en la región externa ( $r \geq a$ ), la cantidad relevante en conexión con la dinámica del decaimiento es la densidad de probabilidad,  $|\Psi_{ex}|^2$ . Para estudiar esta cantidad y verificar nuestras expresiones asintóticas, utilizamos el modelo del

potencial delta de Dirac y el estado inicial discutido al principio de este capítulo. En nuestro estudio numérico de la densidad de probabilidad, observamos que, a diferencia de lo que ocurre en la región interna,  $|\Psi_{ex}|^2$  exhibe un frente de onda bien definido cuando es analizada como función de  $r$  ó  $t$ . Un efecto interesante que se encontró al analizar la evolución del frente como función de la posición, es la propagación de dicha estructura en la región  $r > a$  para distintos valores de  $t$ . El frente exhibe un comportamiento peculiar: su amplitud crece conforme la posición  $r$  se incrementa, y dicho crecimiento está gobernado por una exponencial que crece en el tiempo. Además, conforme el frente avanza en  $r$ , su dispersión en el espacio disminuye, *i.e.*, la densidad de probabilidad muestra un frente cada vez más delgado y más alto conforme el tiempo aumenta. El frente en  $|\Psi_{ex}|^2$  también se manifiesta en la evolución temporal para distintos valores fijos de la posición. Aquí se observa que para un valor fijo de la posición  $r_0$ , la densidad de probabilidad inicia con valores muy pequeños y exhibe un crecimiento abrupto sólo una vez que ha transcurrido un tiempo  $t_0$ , al cual asociamos con la llegada del frente al punto de observación  $r_0$ . Esto nos indica que debemos esperar cierto tiempo para registrar un valor significativo de la densidad de probabilidad. Una vez alcanzado el valor máximo,  $|\Psi_{ex}|^2$  decrece conforme  $t$  aumenta. Este comportamiento general del frente marcó la pauta para caracterizar la posición espacial y temporal de dicha estructura para utilizarla en la fórmula asintótica a tiempos largos de  $\Psi_{ex}$ . Del análisis se demuestra que la posición del frente obedece una relación de la forma  $r = v_q t$  ( $t = r/v_q$ ) en la evolución espacial (temporal). Esto es, demostramos que el frente se propaga en forma aproximada con una velocidad  $v_q = 2\alpha_q$  donde  $\alpha_q$  es la parte real del polo  $k_q$ , *i.e.*,  $\alpha_q = \text{Re } k_q$ , y que además existe una correspondencia en la posición de los máximos en  $r$  con respecto a aquellos observados en  $t$ .

Respecto de las desviaciones no-exponenciales del decaimiento en la región externa, podemos afirmar que es crucial eliminar explícitamente la contribución de  $t^{-1/2}$  en  $\Psi_{ex}$  para garantizar la continuidad de la función de onda en la frontera del potencial,  $r = a$ . En nuestro estudio numérico mostramos que si realizamos nuestros cálculos utilizando la expresión general para la función de onda, la cual involucra la suma de funciones  $M$ , entonces debemos eliminar numéricamente la contribución de  $t^{-1/2}$  para obtener el comportamiento asintótico correcto.

A partir de los resultados y conclusiones obtenidas en nuestro trabajo de investigación,

podemos afirmar que contamos con una herramienta poderosa para estudiar el fenómeno de decaimiento cuántico con base en funciones analíticas exactas. Ciertamente, en el contexto del decaimiento existen otros aspectos interesantes en la dinámica relacionados con los procesos que ocurren a escalas pequeñas de tiempo. Más aún, el enfoque teórico presentado en este trabajo podría ser la base para incursionar en el problema del decaimiento en estructuras cuánticas artificiales en una dimensión, en donde los parámetros que caracterizan a los potenciales pueden controlarse a voluntad. El estudio de estos problemas es una secuela natural del presente trabajo, así como la base de futuras investigaciones.

## Apéndice A

# DESARROLLO ASINTÓTICO PARA LA FUNCIÓN $M(x, q, t)$ PARA TIEMPOS LARGOS

En este apéndice obtendremos el desarrollo para tiempos largos de la función  $M(x, q, t)$ . Este desarrollo se puede obtener a partir de su expresión en términos de la función compleja de error complementario,  $\operatorname{erfc}(y_q)$  (ver ecuaciones (2.35) y (2.37))

$$M(x, q, t) = \frac{1}{2} e^{ix^2/4t} e^{y_q^2} \operatorname{erfc}(y_q), \quad (\text{A.1})$$

en donde  $x$  es un número real (positivo, negativo o cero),  $q$  es un número complejo y  $t$  es un número real positivo. Además,  $y_q$  está definida por

$$y_q = \frac{x - 2qt}{2t^{1/2}} e^{-i\pi/4}. \quad (\text{A.2})$$

Existe un desarrollo asintótico para la función  $\operatorname{erfc}(y_q)$  para argumentos  $y_q$  grandes [41] dado por

$$e^{y_q^2} \operatorname{erfc}(y_q) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi} y_q} + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m \cdot 1 \cdot 3 \dots \cdot (2m-1)}{\sqrt{\pi} 2^m y_q^{2m+1}}, \quad (\text{A.3})$$

aplicable cuando  $|y_q| \gg 1$  y  $|\arg y_q| < \frac{3\pi}{4}$ . Utilizando este desarrollo en la ecuación (A.1), obtenemos que el comportamiento de la función  $M(x, q, t)$  para argumentos  $y_q$  grandes es de la forma

$$M(x, q, t) \simeq i\alpha e^{ix^2/4t} \left[ \frac{1}{y_q e^{i\pi/4}} + \sum_{m=1}^{\infty} (-i)^m \left( \frac{1 \cdot 3 \dots (2m-1)}{2^m} \right) \left( \frac{1}{(y_q e^{i\pi/4})^{2m+1}} \right) \right], \quad (\text{A.4})$$

y que se puede utilizar siempre que el argumento  $y_q$  satisfaga las condiciones

$$|y_q| \gg 1, \quad (\text{A.5})$$

y

$$|\arg y_q| < \frac{3\pi}{4}. \quad (\text{A.6})$$

La constante  $\alpha$  está definida por la ecuación

$$\alpha \equiv \frac{1}{2\pi^{1/2}\sqrt{i}}. \quad (\text{A.7})$$

Un caso especial en la ecuación (A.4) es cuando  $x = 0$ , donde obtenemos que

$$M(q, t) \simeq -i\alpha \left[ \left( \frac{1}{qt^{1/2}} \right) + \sum_{m=1}^{\infty} (-i)^m \left( \frac{1 \cdot 3 \dots (2m-1)}{2^m} \right) \left( \frac{1}{q^{2m+1}t^{m+1/2}} \right) \right], \quad (\text{A.8})$$

con las condiciones  $|q|t^{1/2} \gg 1$  y  $\pi/2 < \arg q < 2\pi$  [63].

Analicemos ahora el caso más general, en donde  $x \neq 0$ . De la condición (A.5) y de la definición de  $y_q$  (ecuación (A.2)), vemos que para poder hacer uso del desarrollo (A.4), necesariamente debe cumplirse que

$$\left| \frac{x}{2t^{1/2}} - qt^{1/2} \right| \gg 1. \quad (\text{A.9})$$

Considerando que nos interesan los desarrollos para tiempos largos, vemos que, *grosso modo*, la ecuación anterior se satisface si

$$\frac{|x|}{2t^{1/2}} \ll 1, \quad (\text{A.10})$$

y

$$|q|t^{1/2} \gg 1. \quad (\text{A.11})$$

en donde hemos tomado en cuenta que  $t$  es siempre una cantidad positiva. Tomando en cuenta estas condiciones para  $x$ ,  $q$  y  $t$ , y desarrollando hasta orden  $t^{-3/2}$ , podemos escribir la ecuación (A.4) como<sup>1</sup>

$$\begin{aligned} M(x, q, t) &\simeq i\alpha \left[ 1 + \frac{ix^2}{4t} \right] \left[ -\frac{1}{qt^{1/2}} - \frac{xq - i}{2q^3} \frac{1}{t^{3/2}} \right], \\ &\simeq -i\alpha \left[ \left( \frac{1}{qt^{1/2}} \right) + \left( \frac{ix^2q^2 + 2xq - 2i}{4q^3} \right) \left( \frac{1}{t^{3/2}} \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Además, si se cumplen las condiciones (A.10) y (A.11), la condición (A.6) se puede reescribir como

$$\frac{\pi}{2} < \arg q < 2\pi. \quad (\text{A.13})$$

Notemos que si en esta última ecuación para  $M(x, q, t)$  hacemos  $x = 0$ , obtenemos el desarrollo a segundo orden de la ecuación (A.8).

<sup>1</sup>Aunque aquí desarrollamos únicamente hasta términos del orden  $t^{-3/2}$  debe quedar claro que podemos hacerlo hasta el orden deseado.

## Bibliografía

- [1] J. Elster y H. Geitel. *Wied. Ann.* **66**, 735 (1889).
- [2] E. Rutherford. *Phil. Mag.* **49**, 1 (1900).
- [3] E. R. von Schweidler. *Premier Congres de Radiologie*. Liege, (1905).
- [4] K. W. F. Kohlrausch. *Akad. Wiss. Wien, Sitz. Ber.* **115**, 637 (1906).
- [5] G. Gamow. *Z. f Phys.* **51**, 204 (1928).
- [6] G. Gamow. *Nature* **122**, 805 (1928).
- [7] R. W. Gurney y E. U. Condon. *Nature* **122**, 439 (1928).
- [8] R. W. Gurney y E. U. Condon. *Phys. Rev.* **33**, 127 (1929).
- [9] H. Geiger y J. M. Nuttall. *Phil. Mag.* **23**, 439 (1912).
- [10] M. Born. *Z. f Phys.* **58**, 306 (1929).
- [11] L. A. Khalfin. *Sov. Phys. JETP* **6**, 1053 (1958).
- [12] J. Petzold. *Z. f Phys.* **155**, 422 (1959).
- [13] R. G. Winter. *Phys. Rev.* **123**, 1503 (1961).
- [14] W. van Dijk, F. Kataoka y Y. Nogami. *J. Phys. A* **32**, 6347 (1999).
- [15] S. R. Wilkinson, C. F. Bharucha, M. C. Fischer, K. W. Madison, P. K. Morrow, Q. Niu, B. Sundaram y M. G. Raizen. *Nature (London)* **387**, 575 (1997).
- [16] Q. Niu y M. G. Raizen. *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3491 (1998).
- [17] E. B. Norman, S. B. Gazes, S. G. Crane y D. A. Bennet. *Phys. Rev. Lett.* **60**, 2246 (1988).

- [18] G. García-Calderón (Editores A. Frank y K. B. Wolf). “*Symmetries in Physics*”, capítulo “Resonant States and the Decay Process”, pág. 252. Springer-Verlag, New York (1992).
- [19] G. García-Calderón, J. L. Mateos y M. Moshinsky. *Phys. Rev. Lett.* **74**, 337 (1995).
- [20] M. Moshinsky. *Phys. Rev.* **84**, 525 (1951).
- [21] M. Moshinsky. *Phys. Rev.* **88**, 625 (1952).
- [22] R. M. Cavalcanti. *Phys. Rev. Lett. Comment* **80**, 4353 (1998).
- [23] G. García-Calderón, J. L. Mateos y M. Moshinsky. *Phys. Rev. Lett. Reply* **80**, 4354 (1998).
- [24] W. van Dijk y Y. Nogami. *Phys. Rev. Lett. Comment* **90**, 028901–1 (2003).
- [25] G. García-Calderón, J. L. Mateos y M. Moshinsky. *Phys. Rev. Lett. Reply* **90**, 028902–1 (2003).
- [26] G. Arfken. “*Mathematical Methods for Physicists*”, pág. 428. Academic Press, New York (1985).
- [27] G. García-Calderón. *Nucl. Phys. A* **261**, 130 (1976).
- [28] R. G. Newton. “*Scattering Theory of Waves and Particles*”. 2nd. Ed. Springer-Verlag, New York, (1982).
- [29] M. Moshinsky. *Phys. Rev.* **91**, 984 (1953).
- [30] G. García-Calderón y R. E. Peierls. *Nucl. Phys. A* **265**, 443 (1976).
- [31] A. J. F. Siegert. *Phys. Rev.* **56**, 750 (1939).
- [32] T. Bergreen. *Nucl. Phys.* **109**, 265 (1968).
- [33] G. García-Calderón y M. Berrondo. *Lett. Nuovo Cimento* **26**, 562 (1979).
- [34] R. M. More y E. Gerjuoy. *Phys. Rev. A* **7**, 1288 (1973).
- [35] W. J. Romo. *J. Math. Phys.* **21**, 311 (1980).

- [36] J. Bang y F. A. Gareev. *Lett. Nuovo Cimento* **32**, 420 (1981).
- [37] G. García-Calderón. *Lett. Nuovo Cimento* **33**, 253 (1982).
- [38] E. C. G. Sudarshan, C. B. Chiu y V. Gorini. *Phys. Rev. D* **18**, 2914 (1978).
- [39] M. Kleber. *Phys. Rep.* **236**, 331 (1994).
- [40] P. R. Holland. “*The Quantum Theory of Motion*”, capítulo 11, sección 6.3. Cambridge Univ. Press, Cambridge (1993).
- [41] M. Abramowitz e I. A. Stegun (Editores). “*Handbook of Mathematical Functions*”, pág. 297. Dover, New York (1964).
- [42] M. L. Goldberger y K. M. Watson. “*Collision Theory*”, capítulo 8. John Wiley & Sons, Inc, New York (1964).
- [43] E. J. Heller. “*Chaos and Quantum Physics.*”. North-Holland, Amsterdam, (1991). Editado por M. J. Giannoni, A. Voros y J. Zinn-Justin.
- [44] R. B. Frey y E. Thiele. *J. Chem. Phys.* **48**, 3240 (1968).
- [45] G. García-Calderón, J. L. Mateos y M. Moshinsky. *Ann. Phys.* **249**, 430 (1996).
- [46] J. J. Sakurai. “*Modern Quantum Mechanics*”. *Revised Edition*. Adison-Wesley Publishing Company, Inc. (1994).
- [47] M. Lévy. *Nuovo Cimento* **14**, 612–624 (1959).
- [48] R. G. Newton. *Ann. Phys.* **14**, 333–345 (1961).
- [49] R. Jacob y R. G. Sachs. *Phys. Rev.* **121**, 350–356 (1961).
- [50] M. L. Goldberger y K. M. Watson. *Phys. Rev.* **136** (1964).
- [51] M. V. Tarent'ev. *Ann. Phys.* **74**, 1–42 (1972).
- [52] M. Razavy. *Int. J. Theor. Phys.* **13**, 237–257 (1975).
- [53] A. Peres. *Ann. Phys.* **129**, 33–46 (1980).

- [54] J. Berger y S. G. Eckstein. *Phys. Rev. A* **26**, 1226–1227 (1982).
- [55] N. N. Nikolaev. *Sov. Phys. Usp.* **11**, 522 (1986).
- [56] D. K. Butt y A. R. Wilson. *J. Phys. A* **5**, 1248 (1972).
- [57] H. M. Nussenzveig. “*Causality and Dispersion Relations*”, pág. 183. Academic Press, New York (1995).
- [58] A. Erdélyi. “*Asymptotic Expansions*”. Dover Publications Inc., New York, (1956).
- [59] R. L. Burden y J. D. Faires. “*Análisis Numérico*”. Grupo Editorial Iberoamérica, S. A. de C. V., México, (1985).
- [60] G. García-Calderón e I. Maldonado. Artículo en proceso.
- [61] G. García-Calderón e I. Maldonado. Artículo en proceso.
- [62] G. P. M. Poppe y C. M. J. Wijers. *ACM TRANS. MATH. SOFTWARE* .
- [63] G. García-Calderón y A. Rubio. *Phys. Rev. A* **55**, 3361 (1997).