

UCH-FC

MAG-F

u83

c-1

UN MODELO QUE SIMULA FRICCIÓN EN
MECÁNICA CUÁNTICA

Tesis
entregada a la
Universidad de Chile
en cumplimiento parcial de los requisitos
para optar al Grado de
Magister en Ciencias Físicas

FACULTAD DE CIENCIAS

por

GILBERTO URZUA DURAN

Agosto, 1987



Patrocinante: Dr. Herbert Massmann L.

Facultad de Ciencias
Universidad de Chile

INFORME DE APROBACION
TESIS DE MAGISTER

Se informa a la Escuela de Posgrado de la Facultad de Ciencias que la Tesis de Magister presentada por el candidato

GILBERTO URZUA DURAN

ha sido aprobada por la Comisión Informante de Tesis como requisito de Tesis para el Grado de Magister en Ciencias Físicas.

Patrocinante de Tesis

Dr. Herbert Massmann L.

Comisión Informante de Tesis

Dr. David Gottfried B.

Dr. Roberto Hojman G.

Dn. Hans Wolfes R.

Herbert Massmann
David Gottfried
R. Hojman
Hans Wolfes



INDICE

	Página
INTRODUCCION	i
Ecuaciones Clásicas de Movimiento	iii
Hamiltoniano de Caldirola-Kanai	iv
Soluciones al Hamiltoniano de Caldirola-Kanai	v
Potenciales no Lineales	vii
Hamiltoniano de Kostin	viii
Soluciones al Hamiltoniano de Kostin	ix
Discusión acerca de los potenciales de Kanai y Kostin	xi
Generalidades sobre el modelo presentado en esta tesis	xi
CAPITULO I	
Una partícula libre en presencia de un corte-oscilador armónico	1
CAPITULO II	
Simulación de fricción para una partícula libre en mecánica cuántica	14



1. Ondas tiempo-independientes	14
2. Paquetes de ondas	25
3. Resultados numéricos para el caso de paquetes de ondas	28
CAPITULO III	
Límite Continuo para una partícula libre	32
1. Límite continuo para $\bar{\epsilon}$ y W	32
2. Caso de ξ , δ , ρ constantes	33
3. Reflexión por una pared	41
4. Fricción dependiente de la velocidad	43
CAPITULO IV	
Penetración a través de una barrera cuadrada en presencia de un corte-oscilador armónico	47
CAPITULO V	
Simulación de Fricción en el proceso de penetración bajo una barrera	57
CONCLUSIONES	71
REFERENCIAS	74



INTRODUCCION

La gran mayoría de los fenómenos físicos que apreciamos cada día muestra un comportamiento disipativo, irreversible.

La disipación de energía es el resultado de la acción de fuerzas de fricción entre el sistema observado y otro hacia el cual fluye la energía en una forma irreversible. Usualmente los detalles de la estructura del sistema que recibe la energía (a menudo llamado reservoir o baño) no interesa.

Cuando en física hablamos de fuerzas de fricción, por cierto no nos referimos a ninguna fuerza distinta de las fuerzas fundamentales conocidas. Recurrimos a este concepto cuando lo que nos interesa de las fuerzas que interactúan con nuestro sistema es el efecto disipativo resultante y no el detalle de las mismas por ser demasiado complicado o irrelevante.

A nivel macroscópico podemos dar cuenta de las fuerzas disipativas usando la formulación Newtoniana de la Mecánica Clásica. Algunos

ejemplos son la fuerza de roce constante en módulo (fricción de Coulomb), la fuerza de roce lineal proporcional a la velocidad (fricción de Stokes) y la fuerza viscosa proporcional a $\nabla^2 \vec{v}$.

Desafortunadamente, tratar fuerzas disipativas dentro del marco de la formulación Hamiltoniana de la Mecánica Clásica es mucho más complicado. En el mundo microscópico gobernado por la mecánica cuántica también aparecen fuerzas disipativas. Su manifestación ha llegado a ser especialmente clara en los campos de la fisión nuclear, resonancias gigantes y colisiones de iones pesados.

Tratar estos fenómenos no es sencillo. Por supuesto, las leyes fundamentales de la dinámica cuántica son del tipo reversible. Un sistema cerrado, digamos el universo, lo suponemos descrito por la ecuación de Schrödinger. La dinámica del sistema es gobernada por el Hamiltoniano que representa su energía total y que es una constante de movimiento. Principalmente, como en la mecánica clásica, la disipación es observada para sistemas abiertos que son sólo una parte del universo. La disipación surge de las interacciones del subsistema con el resto del universo (reservoir). Limitándose al subsistema de interés las variables explícitas del reservoir son eliminadas de la descripción, ya que no se justifica arrastrar una enorme cantidad de información que de hecho será eliminada. Como resultado el reservoir puede ser solamente reconocido en la descripción a través de unos pocos parámetros, tales como la constante de fricción.

A continuación damos una breve reseña de algunos de los modelos que se han usado en mecánica cuántica para tratar fuerzas disipativas.

Nos limitamos a dos tipos de Hamiltonianos: Al convencional explícitamente dependiente del tiempo y a un tipo alternativo de Hamiltoniano no lineal.

Para una descripción más completa el lector puede consultar el trabajo de Dekker (1981).

Ecuaciones Clásicas de Movimiento.

La ecuación de movimiento de una partícula clásica moviéndose en la dirección X con momentum $P = m\dot{X}$ bajo la influencia de una fuerza conservativa $F = -\frac{\partial V}{\partial X}$ y a través de un medio linealmente viscoso es

$$m\ddot{X} + \gamma m\dot{X} + \frac{\partial V}{\partial X} = 0 \quad \text{o} \quad \dot{P} + \gamma P + \frac{\partial V}{\partial X} = 0. \quad (1)$$

La energía de la partícula, i.e., la suma de la energía cinética $\frac{P^2}{2m}$ y la energía potencial V

$$E = T + V \quad (2)$$

no es una constante de movimiento sino que decae de acuerdo a

$$\dot{E} = -(\gamma/m)P^2. \quad (3)$$

La ecuación de movimiento (1) no se puede obtener en forma directa de un Hamiltoniano clásico $H = T + W$, porque no existe un potencial

$W(x,p)$ dependiente del momentum tal que la fuerza de roce $F = -\gamma m \dot{x}$ sea obtenida de $F = -\frac{\partial W}{\partial x} + \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial W}{\partial \dot{x}} \right]$.

Sin embargo el Lagrangiano explícitamente dependiente del tiempo

$$\bar{L} = e^{\gamma t} \left[\frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \right] \quad (4)$$

conduce al momento canónico $\left[\bar{p} = \frac{\partial \bar{L}}{\partial \dot{x}} \right]$

$$\bar{p} = m \dot{x} e^{\gamma t} = p e^{\gamma t} \quad (5)$$

y al Hamiltoniano ($H = \bar{p} \dot{x} - \bar{L}$)

$$H = \left[\frac{\bar{p}^2}{2m} \right] e^{-\gamma t} + V(x) e^{\gamma t} \quad (6)$$

que da las ecuaciones de movimiento (1).

Hamiltoniano de Caldirola-Kanai.

Según la regla usual de cuantización para un Hamiltoniano clásico, el momento canónico conjugado \bar{p} es reemplazado por $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, llegándose al Hamiltoniano cuántico

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} e^{-\gamma t} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) e^{\gamma t} \quad (7)$$

Este es el Hamiltoniano de Caldirola (1941) - Kanai (1948) .

Soluciones al Hamiltoniano de Caldirola-Kanai.

a) Paquetes de ondas.

Un tipo de solución al Hamiltoniano de Caldirola-Kanai, para los casos de partícula libre, partícula en caída libre y de un oscilador armónico son paquetes de ondas que pueden ser expresadas en la misma forma:

$$\psi = \left[\frac{a+a^*}{2\pi a^2} \right]^{1/4} \exp \left[-\frac{(x-X)^2}{2a} + \frac{i}{\hbar} [\bar{P}(x-X) + \int \bar{L} dt - \theta] \right] \quad (8)$$

donde \bar{L} es el Lagrangiano clásico (4) y \bar{P} el momento canónico clásico (5); $a(t)$ es una función compleja y $\theta(t)$ una real diferente en cada caso.

Su densidad de probabilidad es

$$\psi^*\psi = \frac{1}{\pi^{1/2} w} \exp \left[-\frac{(x-X)^2}{w^2} \right], \quad w^2 = \frac{2aa^*}{a+a^*} \quad (9)$$

Es fácil ver que (8) es un paquete de ondas en el sentido que $\langle x \rangle = X$ y $\langle p \rangle = P$ el cual obedece la ecuación de incerteza $\Delta_{\bar{p}} \Delta_x = \frac{1}{2} \hbar |a| / \text{Re}(a)$. Sin embargo, ya que $\Delta_p = \Delta_{\bar{p}} e^{-\gamma t}$, el producto de incerteza de la posición y el momento físico llega a ser menor que $\hbar/2$.

Después de reemplazar el ansatz (8) en la ecuación de Schrödinger, uno obtiene ecuaciones diferenciales para a y θ cuya solución es la siguiente:

- Para partícula libre y partícula en caída libre:

$$a(t) = a_0 + (i\hbar/m\gamma)(1 - e^{-\gamma t}) \quad (10a)$$

$$\theta = 0 \quad (10b)$$

- Para oscilador armónico:

$$a(t) = (\hbar/m)(\Omega + \frac{1}{2} i\gamma)^{-1} e^{-\gamma t} \quad (10d)$$

$$\theta(t) = \frac{1}{2} \hbar \Omega t \quad (10e)$$

Expandiendo la exponencial en la ecuación (10a), $a(t) \approx a_0 + (i\hbar t/m)(1 - \gamma t/2)$, uno observa que los anchos de los paquetes de onda para partículas libres y en caída libre se comportan inicialmente como los anchos de paquetes de ondas sin fricción. A medida que transcurre el tiempo, sin embargo, los anchos llegan a ser constantes en contraste con el caso no amortiguado. Los anchos de las distribuciones del momento canónico permanecen constantes en el tiempo.

Por otra parte, el ancho del paquete de ondas del oscilador armónico tiende a cero, contrayéndose a una función delta mientras que su distribución de momento canónico llega a ser plana. De acuerdo a la incerteza de momento $\Delta_p^2 = \hbar^2 \exp(-2\gamma t)/(a + a^*)$, sin embargo, la distribución de momento físico se contrae a una función delta también.

b. Ondas Planas y Estados Pseudoestacionarios.

Aparte de los paquetes de onda también existen otras soluciones a esta ecuación de Schrödinger que no dan los resultados clásicos para los valores esperados de x y/o p .

Potenciales no Lineales.

Otra clase de Hamiltoniano disipativo puede ser encontrado exigiendo que se satisfaga el valor esperado de la ecuación de movimiento (1), es decir,

$$\langle \dot{p} \rangle + \gamma \langle p \rangle + \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle = 0 . \quad (11)$$

Se debe buscar un operador Hermítico $\gamma W(x, \frac{\partial}{\partial x}; \psi)$ tal que el Hamiltoniano

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V + \gamma W \quad (12)$$

satisfaga la ecuación (11). Se asume la regla usual de cuantización para el momentum $P \rightarrow p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$.

La energía promedio viene dada por

$$\langle E \rangle = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle + \langle V(x) \rangle . \quad (13)$$

Si deseamos identificar el Hamiltoniano con el operador de energía se debe cumplir que

$$\langle W \rangle = 0 . \quad (14)$$

Calculando el valor esperado de $\frac{dp}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, p]$, obtenemos

$$\left\langle \frac{dp}{dt} \right\rangle + \gamma \left\langle \frac{\partial W}{\partial x} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle = 0 . \quad (15)$$

Al comparar las ecuaciones (15) y (11) obtenemos la siguiente ecuación para el potencial adicional W :

$$\left\langle \frac{\partial W}{\partial x} \right\rangle = \langle p \rangle , \quad (16)$$

o, explícitamente,

$$\int \psi^* \frac{\partial W}{\partial x} \psi \, dx = -\frac{1}{2} i\hbar \int (\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi) \, dx . \quad (17)$$

Hamiltoniano de Kostin.

Una solución a la ecuación (16), debida a Kostin (1972), tiene la forma

$$\frac{\partial W_K}{\partial x} = -\frac{1}{2} i\hbar \left[\frac{\partial \psi / \partial x}{\psi} - \frac{\partial \psi^* / \partial x}{\psi^*} \right] = -\frac{1}{2} i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \ln \frac{\psi}{\psi^*} \quad (18)$$

que, una vez integrada, da

$$W_K = -\frac{1}{2} i\hbar \left[\ln \frac{\psi}{\psi^*} - \left\langle \ln \frac{\psi}{\psi^*} \right\rangle \right] , \quad (19)$$

donde el último término fue introducido de tal forma que $\langle W_K \rangle = 0$.

Soluciones al Hamiltoniano de Kostin.

El Hamiltoniano de Kostin (19) tiene el mismo tipo de soluciones que las de Kanai. Ya que el momento canónico coincide con el momento ordinario, el paquete de ondas es

$$\psi = \left[\frac{a+a^*}{2\pi a^2} \right]^{1/4} \exp \left[-\frac{(x-X)^2}{2a} + \frac{i}{\hbar} [P(x-X) + \int L dt - \theta] \right]. \quad (20)$$

Para el ancho $a(t)$ y para $\theta(t)$ se encuentra los siguientes resultados:

- Para partícula libre y partícula en caída libre

$$\dot{a}(t) + \frac{\gamma a(a-a^*)}{2a^*} - \frac{i\hbar}{m} = 0 \quad (21)$$

$$\theta = -\frac{1}{8} i\hbar \gamma \int \frac{(a^2+a^{*2})(a-a^*)}{aa^*(a+a^*)} dt \quad (22)$$

- Para oscilador armónico:

$$a(t) = \frac{\hbar}{m} \omega^{-1} \quad (23)$$

$$\theta(t) = \frac{1}{2} \hbar \omega t. \quad (24)$$

Desafortunadamente, la ecuación diferencial (21) para el ancho $a(t)$ de los paquetes de ondas de la partícula libre y en caída libre, soluciones del Hamiltoniano de Kostin, no puede ser resuelta en forma cerra da.

Hasse (1975) resolvió numéricamente la ecuación (21) con la condición inicial de un paquete mínimo, llegando al siguiente resultado:

$$a(t) = \begin{cases} a_0 + (i\hbar t/m)(1-\gamma t/2) & \text{para } t \rightarrow 0 \\ 4\hbar t/[m(2\sqrt{\gamma t}-i)] & \text{para } t \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (25)$$

Vemos que para tiempos pequeños, los paquetes de ondas de Kostin, para partículas libre y en caída libre, viajan como los de Kanai. Para tiempos largos, sin embargo, llegan a ser más anchos hasta que la distribución de probabilidad es totalmente plana. Simultáneamente el ancho de la distribución de momento llega a ser más angosta y finalmente una delta en forma tal que el principio de incerteza llega a ser $\Delta p \Delta x = \frac{1}{2} \hbar$. En consecuencia, llega a ser un paquete de ondas mínimo, contrariamente al paquete de ondas sin fricción cuyo producto de incerteza va a infinito ya que el ancho de su distribución de momento permanece finito.

La solución de paquete de ondas para el oscilador armónico amortiguado de Kostin fue dado por Kan y Griffin (1974). Los anchos de las distribuciones de probabilidad y momentum permanecen constantes para todos los tiempos con una incerteza de exactamente $\frac{1}{2} \hbar$. Mencionamos, sin embargo, que la frecuencia cuántica ω en (24) es la frecuencia original. Después de haber perdido toda la energía disponible, el oscilador termina en su estado fundamental con energía $\frac{1}{2} \hbar \omega$.

Discusión acerca de los potenciales de Kanai y Kostin.

Los Hamiltonianos de Kanai y de Kostin tienen la característica común de reproducir los resultados de los sistemas cuánticos no amortiguados en el límite $\gamma \rightarrow 0$. Para $\gamma \neq 0$ los valores esperados corresponden a las cantidades clásicas.

En contraposición, los anchos de los paquetes para partículas libres y en caída libre difieren para ambos potenciales; y las soluciones del potencial de Kostin oscilan cuánticamente con la frecuencia clásica original en lugar de la frecuencia clásica reducida como en el caso de Kanai.

Desafortunadamente no existen pruebas experimentales para los anchos y frecuencias cuánticas, que pudieren servir para discriminar entre ellos.

Generalidades sobre el Modelo presentado en esta Tesis.

En esta tesis desarrollaremos un modelo distinto para simular fricción en mecánica cuántica. La idea es encontrar soluciones estacionarias aproximadas de una ecuación de Schrödinger con muchos grados de libertad. De estos muchos grados de libertad se privilegia uno (la coordenada x) que representa la coordenada de interés. Este grado de libertad se acopla con muchos otros, que corresponden a osciladores armónicos cuyos estados finales no interesan.

En el Capítulo I se analiza el problema de una partícula libre acoplada a un solo oscilador. Esto permitirá introducir las ideas básicas del modelo y la notación que se usará de ahí en adelante.

En el Capítulo II el grado de libertad x es acoplado con N osciladores (número finito). El punto principal de este capítulo es la discusión de cómo se puede tratar aproximadamente el problema del movimiento a lo largo del eje x sin verse obligado a retener la información detallada de todos los demás grados de libertad.

En el Capítulo III se analiza el límite en que el número de osciladores es un continuo. Bajo ciertas condiciones es posible identificar una solución que tiene un comportamiento extremadamente clásico.

En los Capítulos IV y V se añade la presencia de una barrera (cajón cuadrado).

Como las soluciones son soluciones estacionarias de la ecuación de Schrödinger lineal, el principio de superposición sigue siendo válido, pudiéndose analizar el comportamiento de un paquete de ondas. Los puntos en común con los otros métodos mencionados en esta introducción son pocos, lo que hace difícil relacionarlos.

El objetivo principal de esta tesis es explorar este novedoso método para así poder ver si se plantea como modelo útil y razonable y si aclara algunos de los puntos débiles de los otros intentos que existen para introducir fricción en mecánica cuántica.

CAPITULO I

UNA PARTICULA LIBRE EN PRESENCIA DE UN CORTE-OSCILADOR ARMONICO

En este capítulo analizamos la solución de la ecuación de Schrödinger que corresponde a una partícula de masa m_0 moviéndose en el potencial

$$V(x, y) = \frac{1}{2} C (y - y^0(x))^2 \quad (1)$$

donde

$$y^0(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < x_1 \\ \Delta & \text{si } x > x_1 \end{cases} \quad (2)$$

Este potencial corresponde al de un valle a lo largo de la dirección x , que en $x = x_1$ está desplazado transversalmente en una cantidad Δ . En la dirección transversal al valle el potencial es el de un oscilador armónico. Al desplazamiento en $x = x_1$ lo llamaremos un "corte-oscilador armónico", ver figura 1. En la región I, el movimiento de la partícula

a lo largo de la dirección x corresponde al de una partícula libre. Lo mismo es cierto en la región II. Solamente en $x = x_1$ los dos grados de libertad están acoplados.

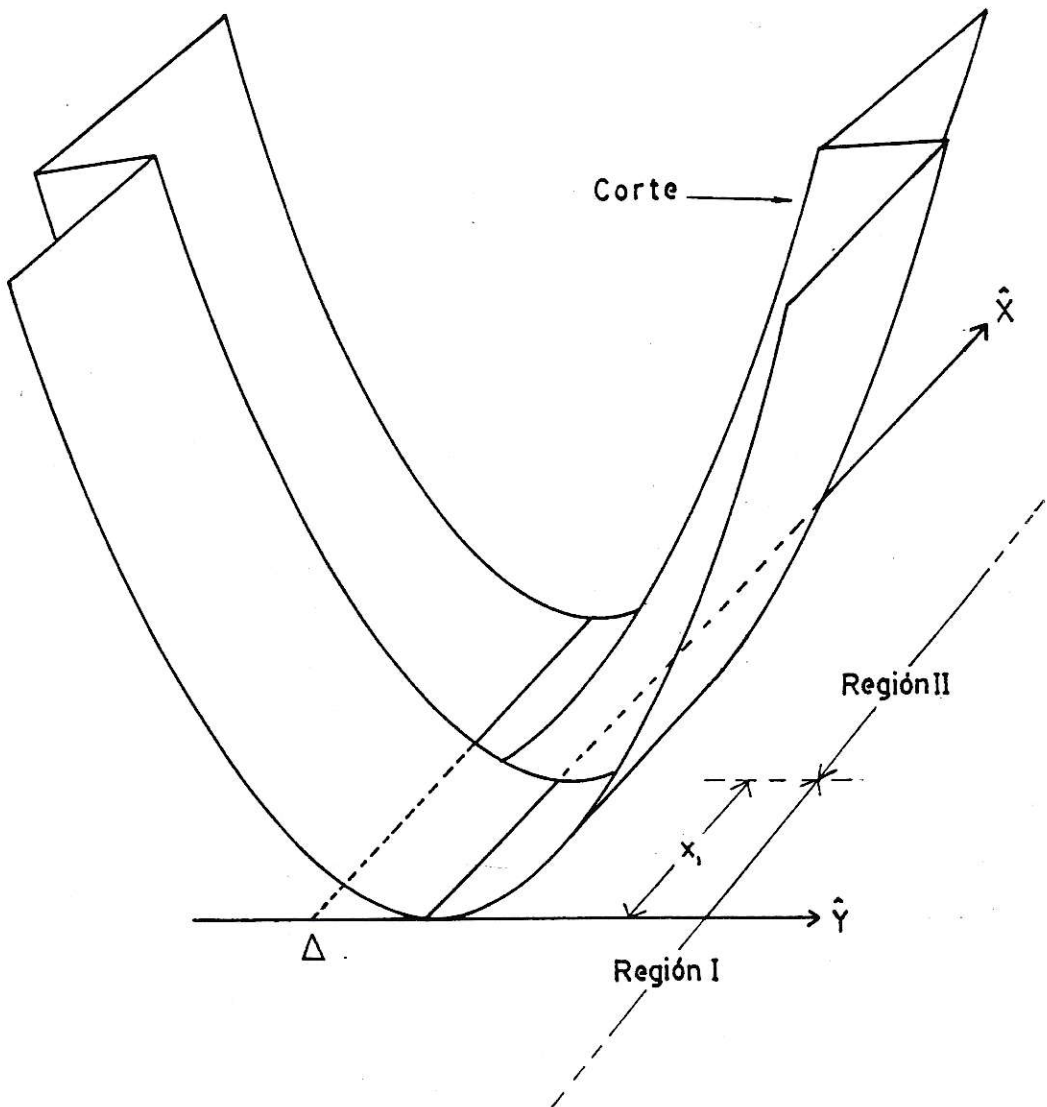


FIGURA 1. Muestra un "corte oscilador armónico" ubicado en $x = x_1$. El desplazamiento entre los valles es Δ .

La ecuación de Schrödinger en la que estamos interesados es

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{C}{2} (y - y^0(x))^2 - (E_0 + \frac{1}{2} \hbar \omega_0) \right] \psi(x, y) = 0 \quad (3)$$

Aquí separamos explícitamente la energía total de la energía del punto cero $\frac{1}{2} \hbar \omega_0$ del oscilador armónico. La frecuencia angular está dada por

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{C}{m_0}} \quad (4)$$

De aquí en adelante, continuaremos escribiendo la función de onda para la coordenada x en la representación de coordenadas, mientras que para el oscilador armónico usaremos la notación de Dirac.

Sean $\{|n\rangle\}$ y $\{|\bar{n}\rangle\}$, $n = 0, 1, 2, \dots$ autoestados del oscilador armónico en las regiones I y II respectivamente, correspondiendo a n quanta.

Introduzcamos también los vectores de onda K_n

$$K_n = + \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} (E_0 - n\hbar\omega_0)} \quad (5)$$

Llamaremos a n un canal abierto si el argumento de la raíz cuadrada es positiva. En caso contrario será un canal cerrado. Para canales cerrados, K_n es un número imaginario puro, y escribimos

$$K_n = + i \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} (n\hbar\omega_0 - E_0)} = i \kappa_n \quad (\text{si } n\hbar\omega_0 > E_0) \quad (6)$$

Ahora podemos escribir la solución general de la ecuación de Schrödinger (3) en las regiones I y II de la forma

$$\begin{aligned}
 |\psi^I(x)\rangle = & \sum_{n \text{ abiertos}} (a_n^{(1)} e^{iK_n(x-x_1)} + a_n^{(2)} e^{-iK_n(x-x_1)}) |n\rangle \\
 & + \sum_{n \text{ cerrados}} a_n^{(3)} e^{\kappa_n(x-x_1)} |n\rangle
 \end{aligned} \tag{7}$$

y

$$\begin{aligned}
 |\psi^{II}(x)\rangle = & \sum_{n \text{ abiertos}} (b_n^{(1)} e^{iK_n(x-x_1)} + b_n^{(2)} e^{-iK_n(x-x_1)}) |\bar{n}\rangle + \\
 & + \sum_{n \text{ cerrados}} b_n^{(3)} e^{-\kappa_n(x-x_1)} |\bar{n}\rangle.
 \end{aligned} \tag{8}$$

Con respecto a los canales cerrados, en las ecuaciones (7) y (8) se han incluido sólo aquellas ondas que decaen exponencialmente a medida que se alejan del corte.

Estamos interesados en la solución para la cual en la región I se tiene sólo una onda incidente (es decir moviéndose hacia el corte) con el oscilador armónico en su estado fundamental. Las condiciones previas implican, para n correspondiendo a un canal abierto, que

$$a_n^{(1)} = \delta_{n0} \tag{9}$$

y

$$b_n^{(2)} = 0. \tag{10}$$

Las funciones de onda (ecuaciones (7) y (8)) pueden, por lo tanto, ser escritas en la forma

$$|\psi^I(x)\rangle = e^{iK_0(x-x_1)} |0\rangle + \sum_{n \in \mathbb{N}^*} a_n e^{-iK_n(x-x_1)} |n\rangle \quad (11)$$

$$|\psi^{II}(x)\rangle = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} b_n e^{iK_n(x-x_1)} |\bar{n}\rangle \quad (12)$$

donde

$$a_n = \begin{cases} a_n^{(2)} & \text{si } n \text{ es un canal abierto} \\ a_n^{(3)} & \text{si } n \text{ es un canal cerrado} \end{cases} \quad (13)$$

$$b_n = \begin{cases} b_n^{(1)} & \text{si } n \text{ es un canal abierto} \\ b_n^{(3)} & \text{si } n \text{ es un canal cerrado} \end{cases} \quad (14)$$

y K_n para canales cerrados está dado por la ecuación (6).

En el corte (i.e. para $x = x_1$), la función de onda y su derivada deben ser continuas, esto es

$$\langle y | \psi^I(x_1) \rangle = \langle y | \psi^{II}(x_1) \rangle \quad \forall y \quad (15)$$

y

$$\frac{\partial}{\partial x} \langle y | \psi^I(x) \rangle |_{x=x_1} = \frac{\partial}{\partial x} \langle y | \psi^{II}(x) \rangle |_{x=x_1} \quad \forall y \quad (16)$$

Usando estas ecuaciones, se encuentran las siguientes relaciones para los coeficientes a_n y b_n :

$$\delta_{m0} = \sum_n \frac{K_m + K_n}{K_0 + K_m} \langle m | \bar{n} \rangle b_n \quad (17)$$

$$a_m = \sum_n \frac{K_0 - K_n}{K_0 + K_m} \langle m | \bar{n} \rangle b_n . \quad (18)$$

Definamos las matrices \mathbb{C} y \mathbb{D} por

$$\mathbb{C}_{mn} = \frac{K_m + K_n}{K_0 + K_m} \langle m | \bar{n} \rangle \quad (19)$$

y

$$\mathbb{D}_{mn} = \frac{K_0 - K_n}{K_0 + K_m} \langle m | \bar{n} \rangle \quad (20)$$

Entonces, para los coeficientes b_n y a_n encontramos que

$$b_n = \mathbb{C}_{no}^{-1} \quad (21)$$

y

$$a_n = \sum_m \mathbb{D}_{nm} \mathbb{C}_{mo}^{-1} . \quad (22)$$

Aquí \mathbb{C}^{-1} es la inversa de la matriz \mathbb{C} . Una vez que las amplitudes a_n y b_n son conocidas, pueden ser evaluados los flujos transmitidos y reflejados t_n y r_n para cada canal abierto. Si el flujo de partículas incidente es igual a 1, entonces

$$t_n = \frac{K_n}{K_0} |b_n|^2 \quad (n \text{ abierto}) \quad (23)$$

y

$$r_n = \frac{K_n}{K_0} |a_n|^2 \quad (n \text{ abierto}). \quad (24)$$

La conservación del flujo de partículas está implícito en la siguiente relación

$$\sum_{n \text{ abierto}} (r_n + t_n) = 1. \quad (25)$$

En este punto es útil describir la imagen del modelo que uno debería tener presente. Una onda se mueve hacia el corte. En la coordenada x es una onda plana del tipo $e^{iK_0 x}$, mientras que en la coordenada y corresponde a un oscilador armónico en su estado fundamental.

Después de sentir la fuerza transversal ejercida en el corte, parte de la onda continuará a lo largo del valle y parte será reflejada. Aquella parte que se transmite, junto con el movimiento en la dirección x , mostrará superpuesto un movimiento oscilatorio en la dirección y . Específicamente será un estado fundamental del oscilador armónico desplazado, es decir un estado coherente de Glauber.

Sean \check{a}^+ y \check{a} los operadores de subida y bajada para el oscilador armónico y sea $\check{\pi}$ el operador

$$\check{\pi} = \frac{i}{\sqrt{2}} (\check{a}^+ - \check{a}) \quad (26)$$

Si $|n\rangle$ es el autoestado del oscilador armónico de la onda moviéndose hacia el corte, entonces el estado para el movimiento en la dirección y de la onda transmitida estará dada por el estado desplazado

$$|\bar{n}\rangle = e^{-i\delta\tau} |n\rangle, \quad (27)$$

donde δ es el desplazamiento adimensional del corte dado por

$$\delta = \sqrt{\frac{m_0 \omega_0}{\hbar}} \Delta. \quad (28)$$

Para el traslape de $|m\rangle$ y $|\bar{n}\rangle$, esto es para los elementos de matriz que aparecen en las ecuaciones (17) - (20), uno encuentra

$$\langle m|\bar{n}\rangle = e^{-\delta^2} \left[\frac{\delta}{\sqrt{2}} \right]^{m-n} \sqrt{\frac{n!m!}{(n-K)! K! (K+m-n)!}} \sum_{K=\text{Max}(0, n-m)}^{\infty} \left[\frac{-\delta^2}{2} \right]^K. \quad (29)$$

Para el caso particular en que $m = 0$ esta ecuación se reduce a

$$\langle 0|\bar{n}\rangle = e^{-\delta^2/4} \left[\frac{\delta}{\sqrt{2}} \right]^n \frac{1}{\sqrt{n!}}. \quad (30)$$

Introducimos un segundo parámetro adimensional

$$\xi = \frac{\hbar\omega_0}{E_0}. \quad (31)$$

Para las razones $\frac{K_n}{K_0}$ uno encuentra

$$\frac{K_n}{K_0} = \sqrt{1 - \xi n} . \quad (32)$$

De las ecuaciones (19) - (24) se observa que el proceso físico queda determinado por los dos parámetros adimensionales δ y ξ . Note que si $n > \frac{1}{\xi}$ entonces n corresponderá a un canal cerrado; en ese caso

$$\frac{K_n}{K_0} = i \sqrt{\xi n - 1} . \quad (33)$$

Las figuras 2a y 2b dan los resultados para los flujos transmitidos y reflejados de partículas como función de ξ para $\delta = 1.0$. La característica importante de esta figura que será usada en las secciones siguientes es que para valores pequeños de ξ , el flujo de partículas transmitidas a los canales elástico e inelásticos llega a ser independiente de ξ , mientras que el flujo de partículas reflejadas disminuye como ξ^2 .

En la figura 2a, las discontinuidades en la derivada de los flujos para los distintos canales ocurren cuando el parámetro ξ pasa por un umbral.

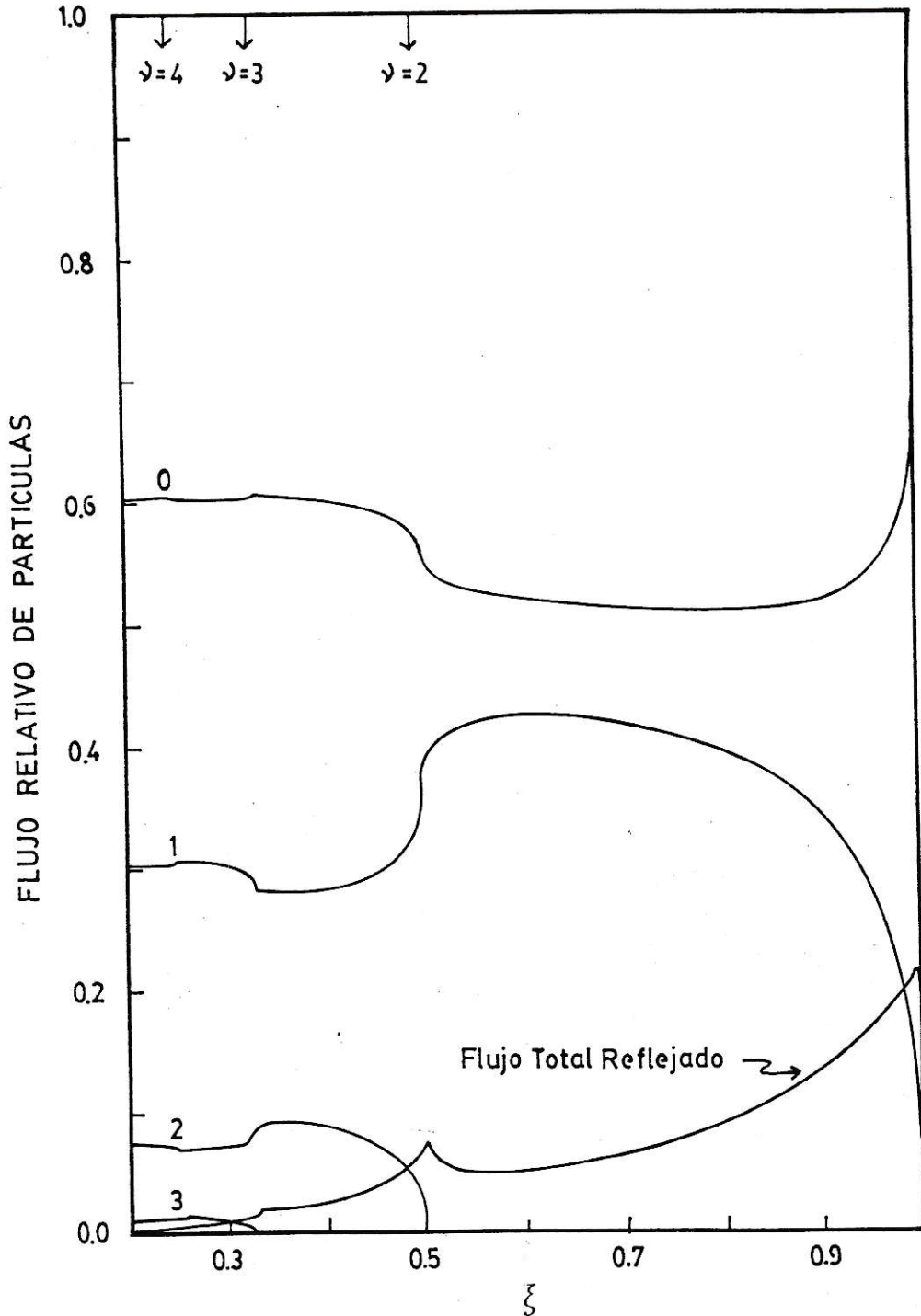


FIGURA 2a. Flujo relativo de partícula versus $\xi = \hbar\omega_0/E_0$. En el extremo superior izquierdo se indican los valores de ξ para los cuales se abren los canales $\nu = 2, 3, 4$.

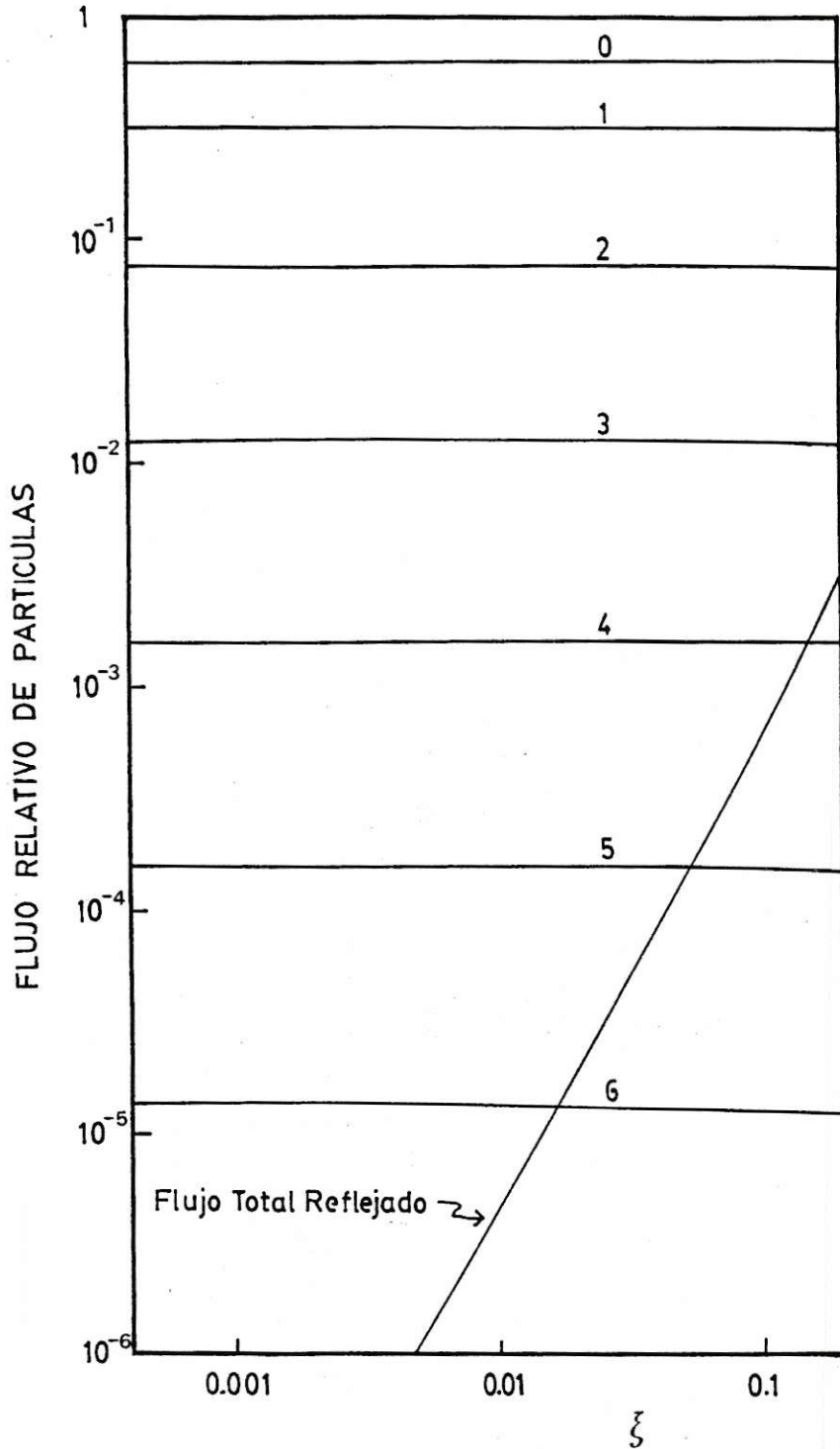


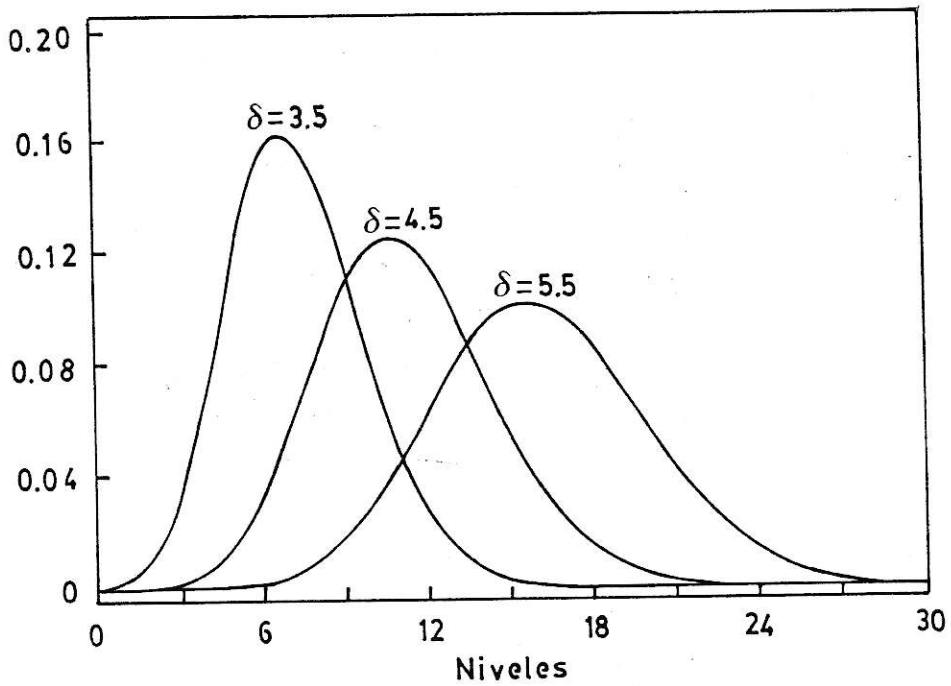
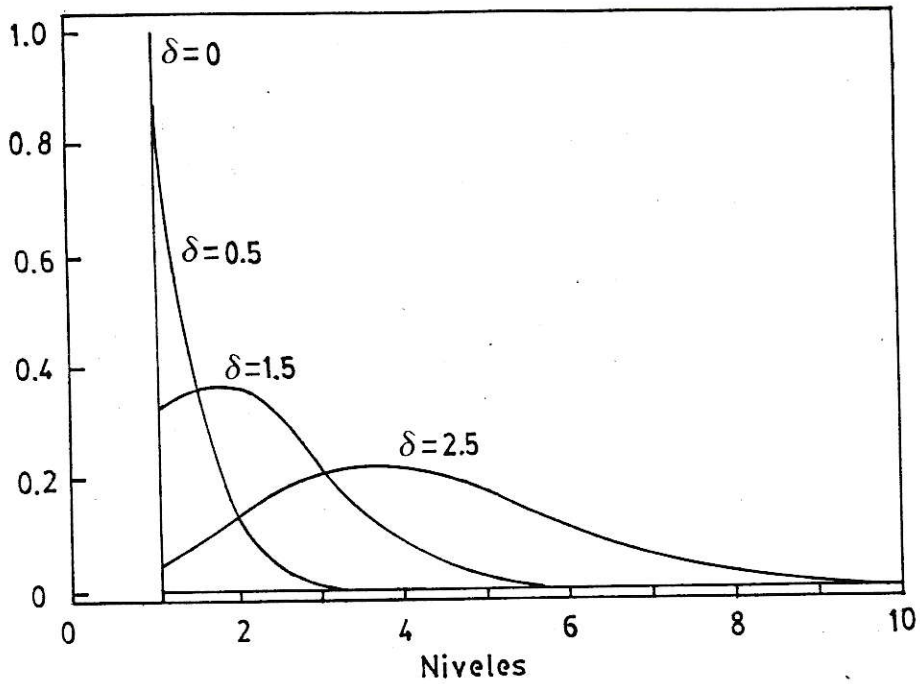
FIGURA 2b. Se muestra la continuación de la figura 2a para el caso de valores pequeños de ξ . Note los cambios de escala. Vemos que a medida que ξ decrece el flujo transmitido a los diferentes canales se mantiene constante, mientras que el flujo total reflejado decrece como ξ^2 .

Las figuras 3a y 3b muestran la probabilidad de encontrar a la partícula en los diferentes niveles del oscilador desplazado, en función del desplazamiento entre ellos. Ambos osciladores tienen la misma constante ω_0 . Si el desplazamiento es $\delta = 0$, la partícula se encuentre en el estado fundamental. A medida que δ crece, aumenta la probabilidad de encontrarla en estados excitados. Vemos que para $\delta = 5.5$ la distribución es prácticamente una Gaussiana centrado en el nivel 15.

La cantidad de energía que pierda la partícula al cruzar el corte es $\Delta E = \hbar \omega_0 \sum_v |\langle v | 0 \rangle|^2$. Usando las ecuaciones (I-30) y (I-28) se puede ver que

$$\Delta E = \frac{1}{2} m_0 \omega_0^2 \Delta^2 \quad (34)$$

donde Δ es el desplazamiento entre los potenciales.



FIGURAS 3a y 3b: Probabilidad de encontrar a la partícula en los diferentes niveles del oscilador desplazado, para diferentes valores de δ .

CAPITULO II

SIMULACION DE FRICCION PARA UNA PARTICULA LIBRE EN MECANICA CUANTICA

1. Ondas tiempo-independientes.

La idea central de este trabajo es usar muchos cortes-oscilador armónico para describir fricción, es decir, para describir la pérdida de energía de una onda que viaja en la dirección x a otros grados de libertad.

El requisito de que la energía cinética del movimiento en la dirección x sea disipada a muchos grados de libertad será satisfecho introduciendo N cortes a lo largo del valle, cada uno, sin embargo, para una coordenada y_n diferente, $n = 1, 2, \dots, N$. La ecuación de Schrödinger en la que estamos interesados ahora es

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \sum_{n=1}^N \left[\frac{-\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial y_n^2} + \frac{C}{2} (y_n - y_n^{(0)}(x))^2 \right] - (E_0 + \frac{N}{2} \hbar \omega_0) \right] \psi(x, y_1, \dots, y_N) = 0 \quad (1)$$

donde

$$y_n^{(0)}(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < x_n \\ \Delta & \text{si } x > x_n \end{cases} \quad (2)$$

El conjunto $\{x_n\}_{n=1, \dots, N}$ corresponde a la posición de los N cortes (ver figura N° 4). Las regiones en las cuales la dirección x es dividida por los N cortes están numeradas de 1 a $N+1$.

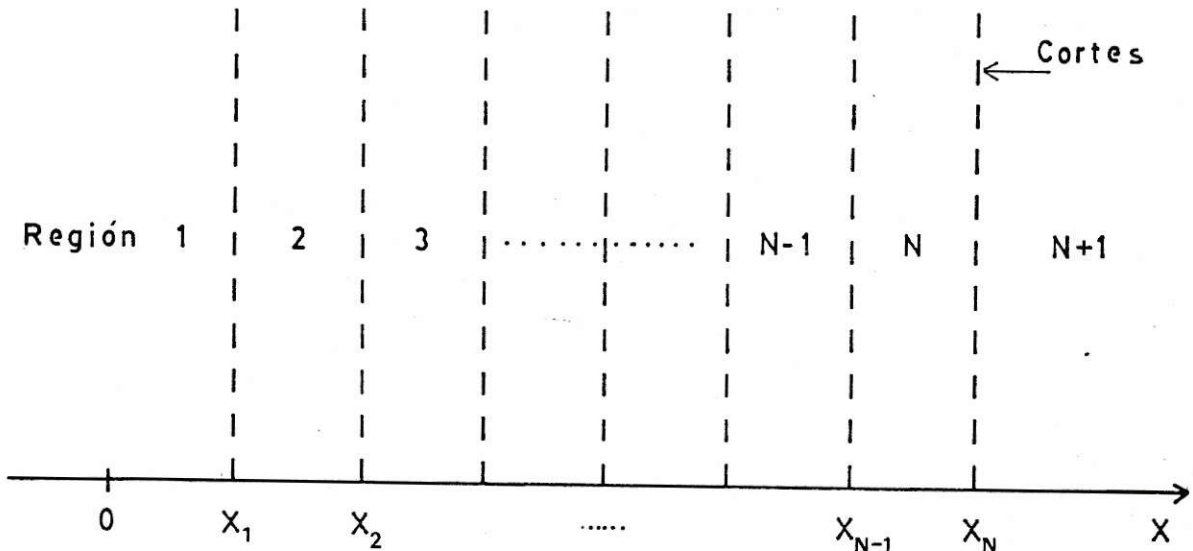


FIGURA 4. Muestra la posición de los N cortes. La partícula se mueve a lo largo del eje x .

Los Kets que corresponden al oscilador armónico del grado de libertad n (esto es el grado de libertad que puede ser excitado pasando a través del corte n) serán caracterizados por un subíndice n . Los Kets $\{|v\rangle_n\}_{v \in \mathbb{N}^*}$ serán los autoestados a la izquierda de x_n , mientras que los Kets $\{|\bar{v}\rangle_n\}_{v \in \mathbb{N}^*}$ serán los autoestados a la derecha de x_n . Aquí $|\bar{v}\rangle_n$ es igual a $|v\rangle_n$ desplazado.

Para poder resolver el problema de muchos cortes, introduciremos una aproximación clave: Despreciaremos todas las ondas reflejadas en la dirección $-\hat{x}$ en cada corte. A primera vista no parece claro que se pueda hacer esta aproximación. Sin embargo, veremos que bajo ciertas condiciones es justificada.

La clave viene dada por la figura 2a. Allí se puede ver que para un (o cada) corte el flujo inelástico de partículas transmitidas (que es el responsable de la energía entregada a los osciladores) no cambia a medida que ξ disminuye (si ξ es ya pequeño). Sin embargo vemos que el flujo de partículas reflejadas decrece como ξ^2 .

Supongamos ahora que existe un cierto número de cortes a lo largo del valle (i.e. a lo largo de la coordenada x) dentro de una zona finita de longitud L . Incrementemos el número de cortes en la zona en un factor M y simultáneamente hagamos decrecer ξ en el mismo factor.

Decreciendo ξ , el flujo de energía a los osciladores armónicos en cada corte se reduce en un factor M , pero ya que el número de cortes ha aumentado por el mismo factor, el flujo total de energía cedida a los osciladores (esto es la energía pérdida en fricción) permanecerá inalterada.

Por otra parte, a menos que la suma de las ondas reflejadas en la dirección $-\hat{x}$ por cada corte se produzca en forma coherente, el flujo total de partículas reflejadas disminuirá en un factor M .

En resumen, incrementando el número de cortes por M y simultáneamente decreciendo ξ por el mismo factor, esencialmente se obtendrá la misma pérdida de energía, pero con una reducción de la onda reflejada.

Repitiendo este procedimiento es posible lograr que la onda total reflejada sea despreciable.

Como ya hemos dicho, esta conclusión no es válida si las reflexiones en cada corte se producen en forma coherente. Pero, una reflexión coherente significativa puede ser evitada escogiendo $L \gg \lambda_0$, donde L es una distancia sobre la cual la partícula pierde una parte substancial de su energía y λ_0 es una longitud de onda típica de la partícula (por ejemplo la longitud de onda que la partícula tenía antes de ingresar a la zona de fricción). Estas restricciones son las mismas que las condiciones bajo las cuales es válida la aproximación semiclásica WKB.

Si las ondas reflejadas son despreciadas, entonces las funciones de onda para las primeras tres regiones pueden ser escritas de la forma

$$|\psi^1(x)\rangle = e^{iK_0(x-x_1)} \prod_{n=1}^N |0\rangle_n \quad x < x_1 \quad (3)$$

$$|\psi^2(x)\rangle = \sum_{\nu} a_{\nu}^{(2)} e^{iK_{\nu}(x-x_2)} |\bar{\nu}\rangle_1 \prod_{n=2}^N |0\rangle_n \quad x_1 < x < x_2 \quad (4)$$

$$|\psi^3(x)\rangle = \sum_{\nu\mu} b_{\nu\mu}^{(3)} e^{iK_{\nu+\mu}(x-x_3)} |\bar{\nu}\rangle_1 |\bar{\mu}\rangle_2 \prod_{n=3}^N |0\rangle_n \quad x_2 < x < x_3 \quad (5)$$

El valor de cada coeficiente $b_{\nu\mu}^{(3)}$ depende de las condiciones de borde impuestas en $x = x_2$.

Si se impone la condición de continuidad de la función de onda en $x = x_2$

$$|\psi^2(x_2)\rangle = |\psi^3(x_2)\rangle,$$

se llega a la relación

$$b_{\nu\mu}^{(3)} = e^{-iK_{\mu+\nu}(x_2-x_3)} a_{\nu}^{(2)} {}_2\langle\bar{\mu}|0\rangle_2. \quad (6)$$

Por otra parte, si se impone la continuidad de la derivada en $x = x_2$

$$\frac{\partial}{\partial x} |\psi^2(x)|_{x=x_2} = \frac{\partial}{\partial x} |\psi^3(x)|_{x=x_2},$$

se llega a la relación

$$b_{\nu\mu}^{(3)} = \frac{K_{\nu}}{K_{\nu+\mu}} e^{-iK_{\nu+\mu}(x_2-x_3)} a_{\nu}^{(2)} {}_2\langle\bar{\mu}|0\rangle_2. \quad (7)$$

Sin embargo, si deseamos que el flujo de partículas sea conservado en $x = x_2$, la relación entre los coeficientes $b_{\nu\mu}^{(3)}$ y $a_{\nu}^{(2)}$ debe ser

$$b_{\nu\mu}^{(3)} = \sqrt{\frac{K_\nu}{K_{\nu+\mu}}} e^{-iK_{\nu+\mu}(x_2-x_3)} a_\nu^{(2)} {}_2\langle \bar{\mu}|0\rangle_2. \quad (8)$$

La ecuación (8) es algo intermedia entre las ecuaciones (6) y (7). La diferencia entre las tres ecuaciones (6) - (8) es pequeña. Ellas difieren en términos que son proporcionales a ξ .

Será útil, aunque de ninguna manera necesario ni físicamente relevante, escoger los estados de los osciladores armónicos de tal manera que el traslape ${}_j\langle \bar{\mu}|0\rangle_j$ sea un número real positivo. Si los estados desplazados están dados por (I-27) entonces

$$\Gamma_\mu =: {}_j\langle \bar{\mu}|0\rangle_j = \frac{1}{\sqrt{\mu!}} e^{-\delta^2/4} \left[\frac{-\delta}{\sqrt{2}} \right]^\mu \quad \forall j. \quad (9)$$

Γ_μ será un número real positivo si δ (esto es Δ) se elige negativo.

En este trabajo sólo estaremos interesados en cómo la energía en la dirección de movimiento a lo largo del valle fluye hacia los otros grados de libertad y no en el detalle de cómo queda distribuida entre ellos. La información contenida en la ecuación (5) es excesiva para nuestros propósitos. Podemos reescribir la ecuación (5) de la forma

$$|\psi^3(x)\rangle = \sum_\nu \left[\sum_{\mu \leq \nu} b_{\nu-\mu,\mu}^{(3)} |{}_{\nu-\mu}\rangle_1 |{}_{\bar{\mu}}\rangle_2 \right] \cdot e^{iK_\nu(x-x_3)} \prod_{n=3}^N |0\rangle_n \quad (10)$$

Definamos el estado $|\bar{v}\rangle_{12}$ por

$$|\bar{v}\rangle_{12} = \sum_{\mu \leq v} \frac{|b_{v-\mu, \mu}^{(3)}|}{\left(\sum_{\sigma \leq v} |b_{v-\sigma, \sigma}^{(3)}|^2 \right)^{1/2}} |\bar{v-\mu}\rangle_1 |\bar{\mu}\rangle_2 . \quad (11)$$

Los estados $|\bar{v}\rangle_{12}$ denotan (de un modo incompleto) que hay v quanta distribuidos entre los osciladores 1 y 2. De esta manera podemos escribir el paréntesis cuadrado de la ecuación (10) como

$$\sum_{\mu \leq v} b_{v-\mu, \mu}^{(3)} |\bar{v-\mu}\rangle_1 |\bar{\mu}\rangle_2 = a_v^{(3)} |\bar{v}\rangle_{12} \quad (12)$$

donde

$$|a_v^{(3)}|^2 = \sum_{\mu \leq v} |b_{v-\mu, \mu}^{(3)}|^2 = \sum_{\mu \leq v} \Gamma_{\mu}^2 |a_{v-\mu}^{(2)}|^2 \frac{K_{v-\mu}}{K_v} . \quad (13)$$

La fase de $a_v^{(3)}$ es físicamente irrelevante. Sin embargo, para algunos casos será posible dar una interpretación sugerente si ésta se es coge igual a la del coeficiente $b_{v-\mu, \mu}^{(3)}$ "más grande". Esto es, para un v fijo, buscamos el valor de μ que maximice $|b_{v-\mu, \mu}^{(3)}|$, y asignamos a la fase de $a_v^{(3)}$ el valor que tiene la fase de ese $b_{v-\mu, \mu}^{(3)}$.

Usando la ecuación (12), obtenemos que la función de onda en la región 3 está dada por

$$|\psi^3(x)\rangle = \sum_v a_v^{(3)} e^{iK_v(x-x_3)} |\bar{v}\rangle_{12} \prod_{n=3}^N |0\rangle_n . \quad (14)$$

Generalizando, si la función de onda en la región s está dada por

$$|\psi^s(x)\rangle = \sum_{\nu} a_{\nu}^{(s)} e^{iK_{\nu}(x-x_s)} |\bar{\nu}\rangle_{1, \dots, s-1} \prod_{n=s}^N |0\rangle_n, \quad (15)$$

entonces podemos escribir la función de onda en la región $s+1$ en la forma

$$|\psi^{s+1}(x)\rangle = \sum_{\nu} a_{\nu}^{(s+1)} e^{iK_{\nu}(x-x_{s+1})} |\bar{\nu}\rangle_{1, \dots, s} \prod_{n=s+1}^N |0\rangle_n \quad (16)$$

donde

$$|a_{\nu}^{(s+1)}|^2 = \sum_{\mu \leq \nu} \Gamma_{\mu}^2 |a_{\nu-\mu}^{(s)}|^2 \frac{K_{\nu-\mu}}{K_{\nu}}. \quad (17)$$

Para la fase de $a_{\nu}^{(s+1)}$ usamos la misma prescripción antes mencionada. Esto da

$$\text{fase de } a_{\nu}^{(s+1)} = \text{fase de } a_j^{(s)} + K_{\nu}(x_{s+1} - x_s) \quad (18)$$

donde j es el valor que maximiza $|a_j^{(s)} \Gamma_{\nu-j}|$. Con esta prescripción la fase acumulada por los coeficientes $a_{\nu}^{(s+1)}$ es esencialmente igual a la fase semiclásica de una partícula con vector de onda variable.

La situación que corresponde al concepto clásico de fricción de Coulomb, se obtendrá si $N \gg 1$, los cortes están distribuidos uniformemente sobre una distancia no demasiado corta y la pérdida de energía de cada corte se mantiene pequeña.

Consideremos ahora la situación que ocurre si $|\xi| \ll 1$ y $|\delta| \ll 1$ simultáneamente. Después de pasar a través de varios cortes y que la

pérdida de energía no es despreciable, la distribución del flujo de partículas será una Gaussiana en los diferentes canales de energía. Esto es

$$|a_v^{(s)}|^2 \frac{K_v}{K_0} \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{\pi} w_s} \exp \left\{ - \left[\frac{\epsilon_v - \bar{\epsilon}_s}{w_s} \right]^2 \right\} \quad (19)$$

donde

$$\epsilon_v = \frac{E_0 - \sqrt{\hbar} \omega_0}{E_0} = 1 - v \xi. \quad (20)$$

Para $|\delta| \ll 1$ solamente Γ_0 y Γ_1 serán relevantes. Escribamos la ecuación (17) manteniendo solamente los términos $\mu = 0, 1$:

$$\frac{K_v}{K_0} |a_v^{(s+1)}|^2 \approx \Gamma_0^2 \frac{K_v}{K_0} |a_v^{(s)}|^2 + \Gamma_1^2 \left[\frac{K_{v-1}}{K_0} |a_{v-1}^{(s)}|^2 \right]. \quad (21)$$

Usando adicionalmente el hecho que el flujo de partículas debe conservarse en el corte "s", encontramos que los coeficientes de acoplamiento Γ_0^2 y Γ_1^2 tienen que ser

$$\Gamma_0^2 = \frac{2}{2 + \delta^2} \quad \text{y} \quad \Gamma_1^2 = \frac{\delta^2}{2 + \delta^2}. \quad (22)$$

Sustituyendo estas ecuaciones y (19) en (21) encontramos que

$$\frac{1}{w_{s+1}} \exp \left\{ - \left[\frac{\epsilon - \bar{\epsilon}_{s+1}}{w_{s+1}} \right]^2 \right\} = \frac{2}{2 + \delta^2} \frac{1}{w_s} \exp \left\{ - \left[\frac{\epsilon - \bar{\epsilon}_s}{w_s} \right]^2 \right\} + \frac{\delta^2}{2 + \delta^2} \frac{1}{w_s} \exp \left\{ - \left[\frac{\epsilon + \xi - \bar{\epsilon}_s}{w_s} \right]^2 \right\}. \quad (23)$$

Al buscar el valor de ϵ que maximiza el lado derecho de la ecuación (23) se encuentra la siguiente relación entre $\bar{\epsilon}_{s+1}$ y $\bar{\epsilon}_s$:

$$\bar{\epsilon}_{s+1} = \bar{\epsilon}_s - \frac{1}{2} \delta^2 \xi. \quad (24)$$

Multiplicando la ecuación (23) por $(\epsilon - \bar{\epsilon}_{s+1})^2$ e integrando sobre ϵ encontramos que

$$w_{s+1}^2 = w_s^2 + (\delta \xi)^2 \quad (25)$$

Las ecuaciones (24) y (25) dan la disipación y dispersión de energía sufrida por la onda monocromática incidente, a medida que cruza los diferentes cortes. Vea también figura 5.

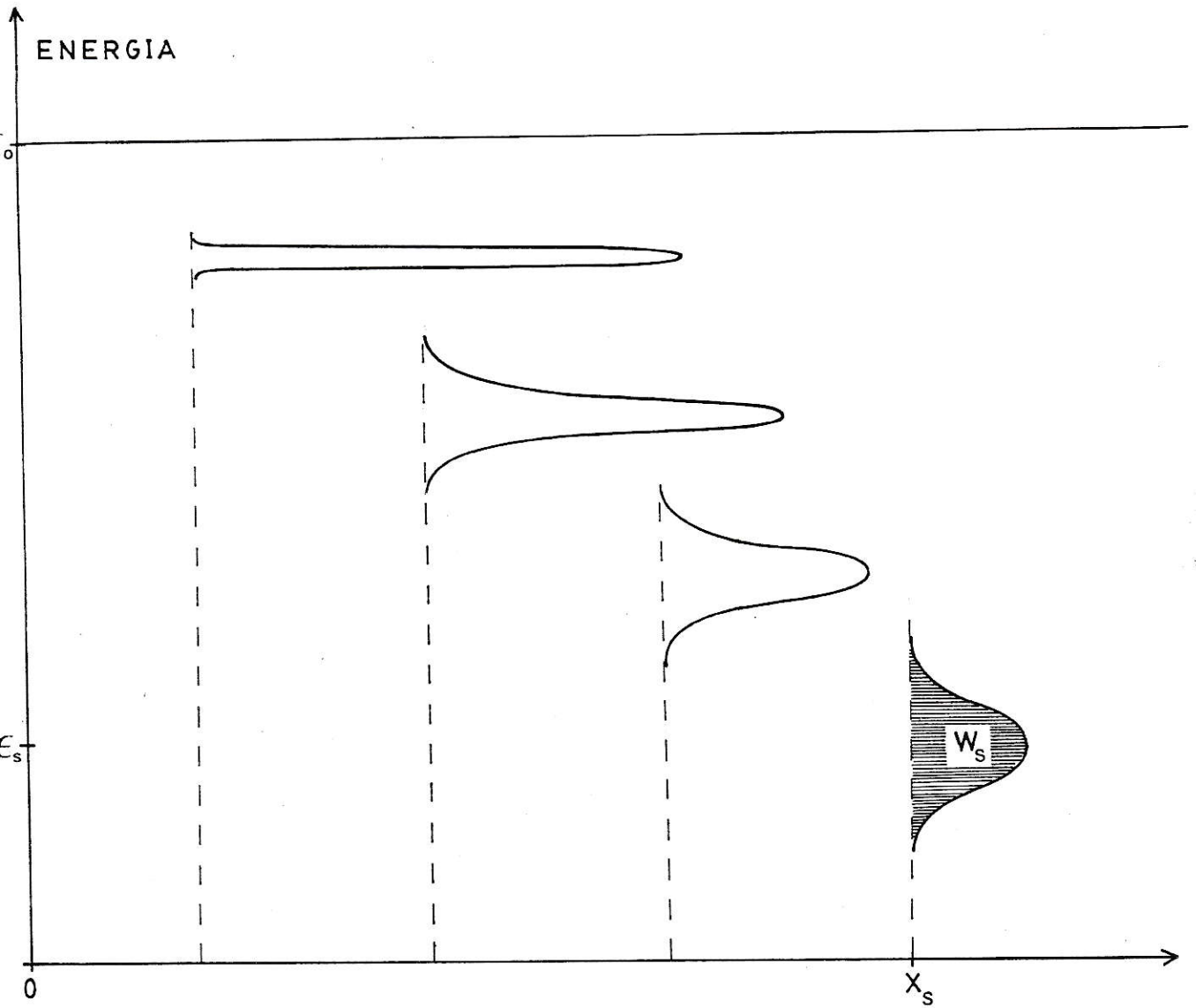


FIGURA 5: Se ilustra la disipación y dispersión de energía que sufre la onda monocromática incidente, a medida que atraviesa los cortes.

2. Paquetes de ondas.

Hasta aquí hemos considerado sólo ondas tiempo-independiente. En este caso el flujo de partículas en cada corte permanece constante mientras que la probabilidad de encontrar una partícula en un intervalo Δx dado aumenta después que las ondas han atravesado un corte.

Ahora investigamos brevemente qué sucede si construimos paquetes de ondas en la dirección de movimiento x . Suponemos que en $t = 0$ tenemos un paquete de ondas Gaussiano centrado en $x = x_0$ en el espacio de coordenadas y en $K = K_0$ en el espacio de momentum. Además suponemos que en $t = 0$ el paquete de ondas "completo" está todavía en la región 1 y que el ancho en el espacio de momento satisface $\Delta K_0 \ll K_0$. En ese caso, la función exponencial de la ecuación (3) es reemplazada por

$$e^{iK_0 x} \rightarrow \varphi(x, t=0) = \frac{e^{iK_0 x}}{\sqrt{\Delta x_0} \sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{1}{4} \left[\frac{x-x_0}{\Delta x_0} \right]^2 \right\}. \quad (27)$$

La evolución temporal de $\varphi(x, t)$ en ausencia de cortes está dada por

$$\varphi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dK \frac{e^{i[K(x-x_0) - \omega(K)t]}}{\sqrt{\Delta K_0} \sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{1}{4} \left[\frac{K-K_0}{\Delta K_0} \right]^2 \right\} \quad (28)$$

$$\text{donde } \hbar\omega(K) = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \quad \text{y} \quad \Delta x_0 \Delta K_0 = \frac{1}{2}. \quad (29)$$

Supongamos que otra vez tenemos la situación mostrada en la figura 4. En la región 1 la función de onda está dada por

$$\begin{aligned}
 |\psi^1(x,t)\rangle &= \varphi(x,t) \prod_{n=1}^N |0\rangle_n e^{-i\frac{N}{2}\omega_0 t} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{e^{i[K(x-x_0)-\omega(K)]t}}{\sqrt{\Delta K_0} \sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{1}{4}\left[\frac{K-K_0}{\Delta K_0}\right]^2\right\} \prod_{n=1}^N |0\rangle_n e^{-i\frac{N}{2}\omega_0 t} \quad (30)
 \end{aligned}$$

Definamos $\alpha(K) = (2\pi)^{-1/2} (2\pi)^{-1/4} (\Delta K_0)^{-1/2} \exp\left\{-\frac{1}{4}\left[\frac{K-K_0}{\Delta K_0}\right]^2\right\}$. Entonces

$$|\psi^1(x,t)\rangle = \int dk \alpha(K) e^{i[K(x-x_0)-\omega(K)]t} \prod_{n=1}^N |0\rangle_n e^{-i\frac{N}{2}\omega_0 t} \quad (31)$$

Ya que nuestro método no es válido para K muy pequeños, la integral tiene que ir sobre un intervalo reducido centrado alrededor de K_0 (típicamente 4 veces la varianza ΔK_0).

En la región 2 la función de onda estará dada por

$$\begin{aligned}
 |\psi^2(x,t)\rangle &= \int dk \alpha(K) \sum_{\nu} a_{\nu}^{(2)}(K) e^{i[K_{\nu}(K)(x-x_1)-\omega_{\nu}(K)t]} \\
 &\cdot |\bar{\nu}\rangle e^{-i(\nu+\frac{1}{2})\omega_0 t} \prod_{n=2}^N |0\rangle_n e^{-\frac{i(N-1)}{2}\omega_0 t} \quad (32)
 \end{aligned}$$

donde $K_{\nu}(K)$ y $\omega_{\nu}(K)$ están definidas por

$$K_{\nu}(K) = K \sqrt{1 - \nu \xi \left[\frac{K_0}{K}\right]^2} \quad (33)$$

$$\hbar\omega_{\nu}(K) = \frac{\hbar^2 K_{\nu}^2(K)}{2m_0} \quad (34)$$

Como antes, el parámetro ξ está dado por

$$\xi = \hbar\omega_0 / \left[\frac{\hbar^2 K_0^2}{2m_0} \right] . \quad (35)$$

En la región 3, la función de onda está dada por

$$|\psi^3(x,t)\rangle = \int dK \alpha(K) \sum_{\nu\mu} b_{\nu\mu}^{(3)} e^{i[K_{\nu+\mu}(K)(x-x_2) - \omega_{\nu+\mu}(K)t]} \cdot |\bar{\nu}\rangle_1 |\bar{\mu}\rangle_2 e^{-i(\nu+\mu+1)\omega_0 t} \prod_{n=3}^N |0\rangle_n e^{-i\frac{(N-2)}{2}\omega_0 t} \quad (36)$$

En analogía con la ecuación (13) tenemos:

$$\sum_{\mu \leq \nu} |b_{\nu-\mu, \mu}^{(3)}|^2 = \sum_{\mu \leq \nu} \Gamma_{\mu}^2 |a_{\nu-\mu}^{(2)}|^2 \frac{K_{\nu-\mu}(K_0)}{K_{\nu}(K_0)} . \quad (37)$$

En (37) hemos usado $K_j(K_0)$ en lugar de $K_j(K)$, para que los coeficientes de la expansión sean independientes de K . Como antes reducimos la información después que la onda ha atravesado un corte.

En la región s la "función de onda" estará dada por

$$|\psi^s(x,t)\rangle = \int dK \alpha(K) \sum_{\nu} a_{\nu}^{(s)} e^{i[K_{\nu}(K)(x-x_{s-1}) - \omega_{\nu}(K)t]} \cdot |\bar{\nu}\rangle_{1, \dots, s-1} e^{-i(\nu + \frac{s-1}{2})\omega_0 t} \prod_{n=s}^N |0\rangle_n e^{-i\frac{N-s+1}{2}\omega_0 t} \quad (38)$$

Los coeficientes $a_v^{(s)}$ son evaluados usando las relaciones de recurrencia (17) y (18) con los valores de a_v en la región 1 dadas por $a_v^{(1)} = \delta_{v0}$.

Para la densidad de partículas $\rho(x,t)$, esto es después de integrar sobre todas las coordenadas de los osciladores, encontramos

$$\rho^S(x,t) = \sum_v |a_v^{(s)}|^2 \int dK \alpha(K) e^{i[K_v(K)(x-x_{s-1}) - \omega_v(K)t]} \quad (39)$$

Para cada v , la integral representa un paquete de ondas moviéndose a la derecha con una velocidad de grupo

$$v = \frac{\hbar K_v}{m_0} \quad (40)$$

3. Resultados numéricos para el caso de paquetes de ondas.

En la figura 6 se muestra la evolución de la densidad de probabilidad en el eje $y = 0$, a medida que la partícula avanza en la dirección x . Allí se ha elegido un paquete con muy poca dispersión en energía ($K_0/\Delta K_0 = 160$), con el propósito de que para un tiempo T igual al periodo del oscilador, prácticamente no presente dispersión en la posición y puede ser ilustrada en forma adecuada la oscilación del paquete en la dirección transversal. Aparte del paquete original, se ha graficado una de las réplicas, consecuencia de la discretización de la integral sobre K .

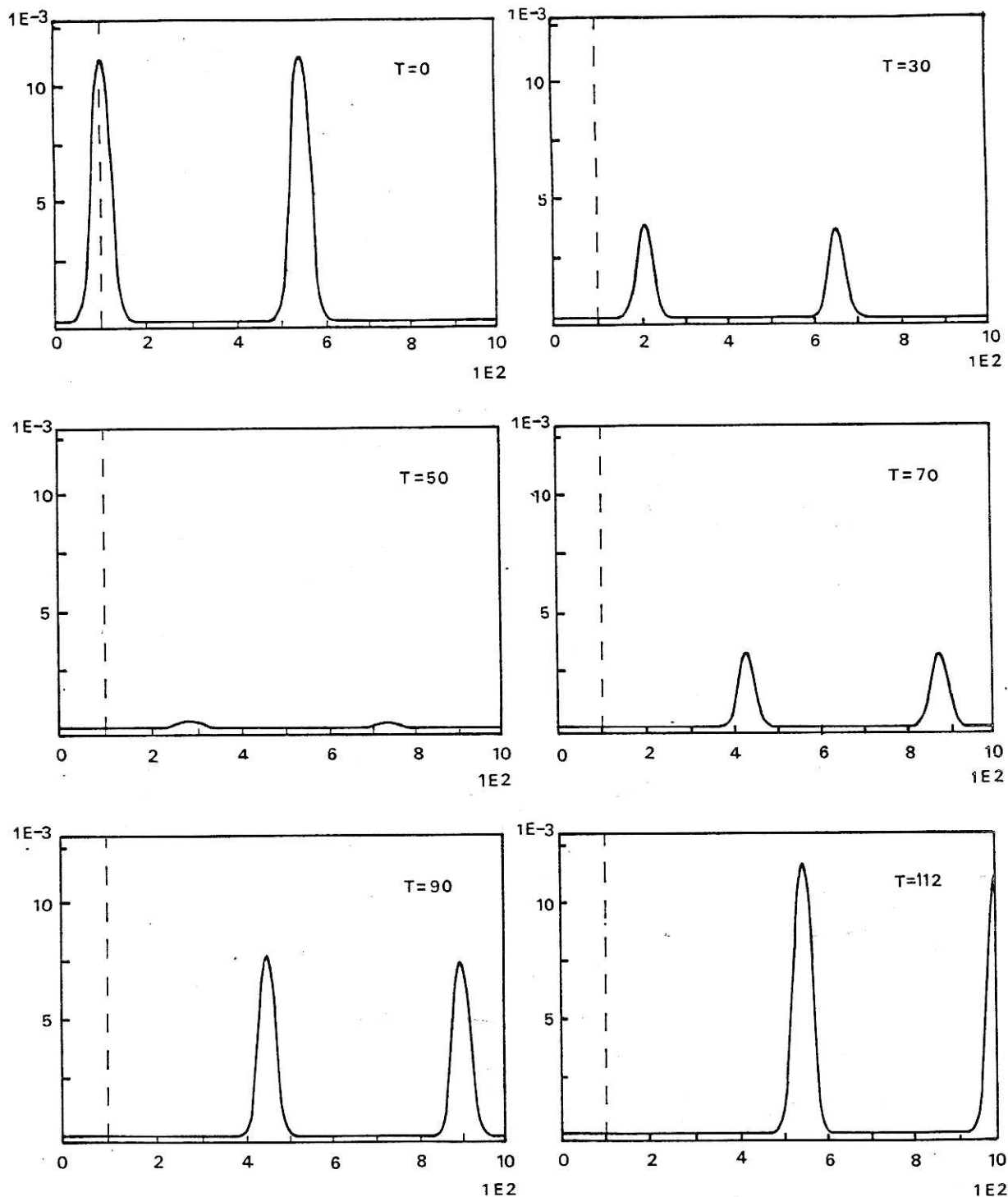


FIGURA 6: Densidad de probabilidad $|\psi(x,0,t)|^2$ para varios tiempos. En $T = 0$ la partícula esta cruzando el corte. $T = 112$ corresponde a un periodo del movimiento oscilatorio en la dirección y . Se ha graficado la primera réplica hacia la derecha.

Densidad de probabilidad en la dirección x.

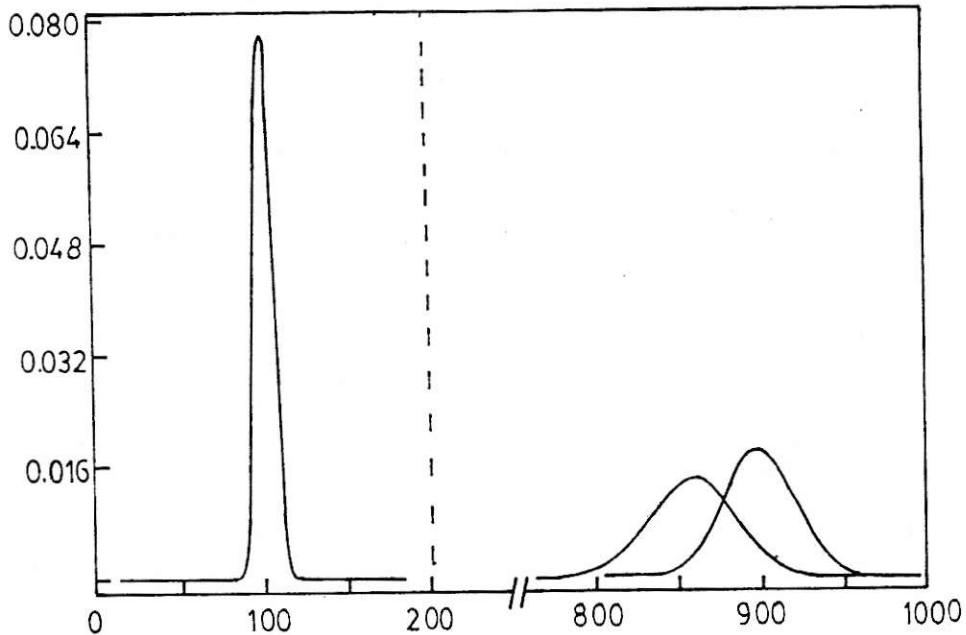


FIGURA 7: Muestra la pérdida de energía cinética y dispersión de un paquete que cruza un corte. (ver texto).

En la figura 7 se muestra la densidad de probabilidad integrada en el eje y . A la izquierda se muestra un paquete Gaussiano normalizado, inicialmente centrado en $x_0 = 100$, con $K_0 = 4$ y varianza $\Delta K_0 = 0.10$. Su energía es $E = \frac{1}{2} \hbar^2 K_0^2 + \frac{1}{2} \hbar^2 (\Delta K_0)^2 = 8.005$ y su velocidad de grupo es $v_g = 4$.

A la derecha, el paquete más alto corresponde al caso en que el desplazamiento δ en el corte es cero, por lo que el paquete no pierde energía y evoluciona con la dispersión natural esperada para un paquete Gaussiano. El paquete más bajo corresponde a un desplazamiento $\delta = 4$.

En este caso se han excitado unos 40 niveles. Vemos que el paquete pierde energía cinética y que su dispersión es mayor que la del anterior. La pérdida de energía cinética en la dirección x es igual a la entrega de energía en la dirección y :

$$\Delta E = \hbar\omega_0 \sum_{\nu} \nu |\langle \bar{\nu} | 0 \rangle|^2 . \quad (41)$$

Para este ejemplo, $\Delta E = 0.9599$ de modo que la velocidad de grupo después de atravesar el corte es $V'_g = 3.7536$ y la posición del centro del paquete en $t = 200$ es 857 .

CAPITULO III

LIMITE CONTINUO PARA UNA PARTICULA LIBRE

1. Límite continuo para $\bar{\epsilon}$ y w .

En lo que sigue estudiamos el caso en que la distancia entre cada corte tiende a cero, introduciendo una densidad de cortes $\rho(x)$. Además permitimos que los parámetros adimensionales δ y ξ varíen como una función de la posición a lo largo del valle. La ecuación (II.24) toma la forma

$$\bar{\epsilon}(x + dx) = \bar{\epsilon}(x) - \frac{1}{2} \delta^2(x) \xi(x) \rho(x) dx , \quad (1)$$

de donde se encuentra

$$\bar{\epsilon}(x) = 1 - \frac{1}{2} \int_0^x \delta^2(x') \xi(x') \rho(x') dx' . \quad (2)$$

En forma análoga, para los anchos encontramos

$$w^2(x) = \int_0^x \delta^2(x') \xi^2(x') \rho(x') dx' . \quad (3)$$

El origen para la coordenada x se escogió en el lugar donde comienza la región de fricción. Allí, en $x = 0$, $\bar{\epsilon} = 1$ y $w = 0$ (ver figura N° 8).

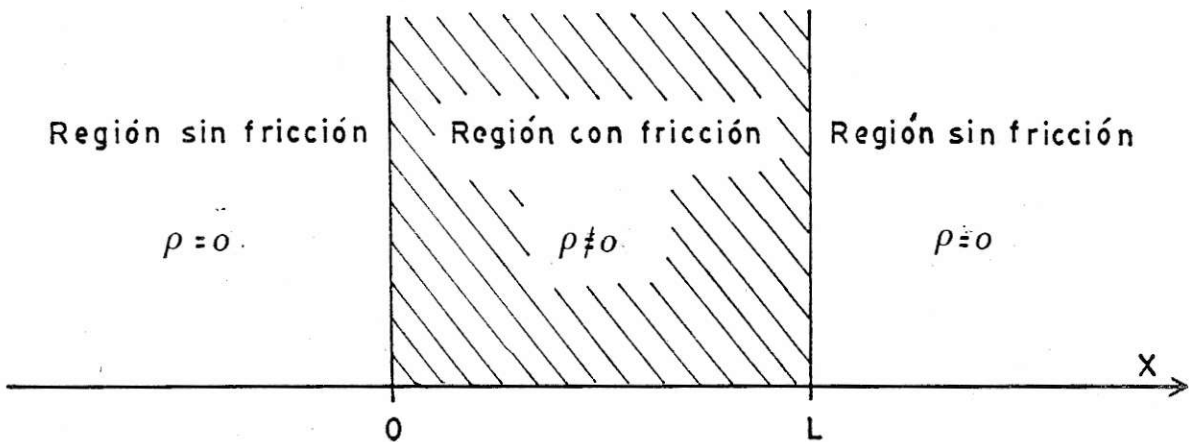


FIGURA 8: Se indica las diferentes regiones atravesadas por la partícula a medida que avanza en la dirección x .

2. Caso de ξ , δ y ρ constantes.

En esta sección suponemos que ξ , δ y ρ son constantes. Entonces, de las ecuaciones (2) y (3) encontramos que

$$\bar{\epsilon}(x) = 1 - \frac{1}{2} \delta^2 \xi \rho x =: 1 - \frac{x}{x_0} \quad (4)$$

y

$$w(x) = \delta \xi \sqrt{\rho x} . \quad (5)$$

Recordemos que las ecuaciones previas son válidas solamente en el límite $|\delta| \ll 1$ y $|\xi| \ll 1$.

En lo que sigue estamos interesados en saber acaso es posible lograr que la partícula pierda una cantidad significativa de su energía, sujeta a la condición de que su dispersión en energía no aumente.

Para ello debe satisfacerse que

$$\delta \xi \sqrt{\rho L} \ll \frac{1}{2} \delta^2 \xi \rho L < 1 \quad (6)$$

o sea,

$$\delta \sqrt{\rho L} \gg 1 . \quad (7)$$

Escogiendo

$$\xi = \xi_0/n , \quad \delta = \delta_0/\sqrt{n} , \quad \rho L = cn^2 \quad (8)$$

uno encuentra que la ecuación (6), la que ahora llega a ser

$$\delta_0 \xi_0 \sqrt{c}/\sqrt{n} \ll \frac{1}{2} \delta_0^2 \xi_0 c < 1 , \quad (9)$$

se satisface para n suficientemente grande escogiendo un valor apropiado para c .

En resumen, vemos que es posible seleccionar las condiciones bajo las cuales una onda monocromática, prácticamente no sufre una dispersión en energía, a medida que avanza a lo largo del valle excitando a los osciladores.

Esto es, para una posición dada, es posible que la onda tenga una energía cinética en la dirección x tan bien determinada como lo estaba antes de ingresar a la zona de fricción.

Evaluemos ahora la amplitud $a(\epsilon, x)$ de la onda. En el límite continuo escribimos

$$|\psi(x)\rangle = \int_0^1 d\epsilon a(\epsilon, x) |\bar{\epsilon}\rangle_x \prod_{y > x} |0\rangle_y \quad (10)$$

Aquí $|\bar{\epsilon}\rangle_x$ no representa un autoestado de un Hamiltoniano sino que solamente es un modo de representar que se ha transferido una cantidad de energía ϵ a los osciladores localizados a la izquierda de x .

En el límite continuo, debemos usar la siguiente expresión para K_0/K_v :

$$\frac{K_0}{K_v} = \frac{1}{\sqrt{1 - v\xi}} = \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} \quad (11)$$

En la última igualdad se ha usado la ecuación (II - 20). Ahora la ecuación (II - 19) llega a ser

$$|a_v^{(s)}|^2 \longrightarrow |a(\epsilon, x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi\epsilon} w(x)} e^{-\left[\frac{\epsilon - \bar{\epsilon}(x)}{w(x)}\right]^2} \quad (12)$$

Usando las ecuaciones (4) y (5) encontramos que

$$|a(\epsilon, x)|^2 = \exp \left\{ - \left[\frac{\epsilon - 1 + \delta^2 \xi \rho x / 2}{\xi \delta \sqrt{\rho x}} \right]^2 \right\} / \delta \xi \sqrt{\pi \rho \epsilon x} \quad (13)$$

Resta por determinar qué fase acompaña a $a(\epsilon, x)$. Como ya lo hemos mencionado, la fase de $a(\epsilon, x)$ no tiene un significado físico particular y depende de la fase que uno ha asignado a $|\bar{\epsilon}\rangle_x$. Nosotros hemos seguido el criterio de mantener en $a(\epsilon, x)$ solamente la fase debida al movimiento a lo largo de la dirección x ; todas las fases arbitrarias introducidas por los cortes son incluidas en $|\bar{\epsilon}\rangle_x$. Evaluemos la fase de $a(x_1, \epsilon_1)$ dentro de este predicamento (ver figura N° 9).

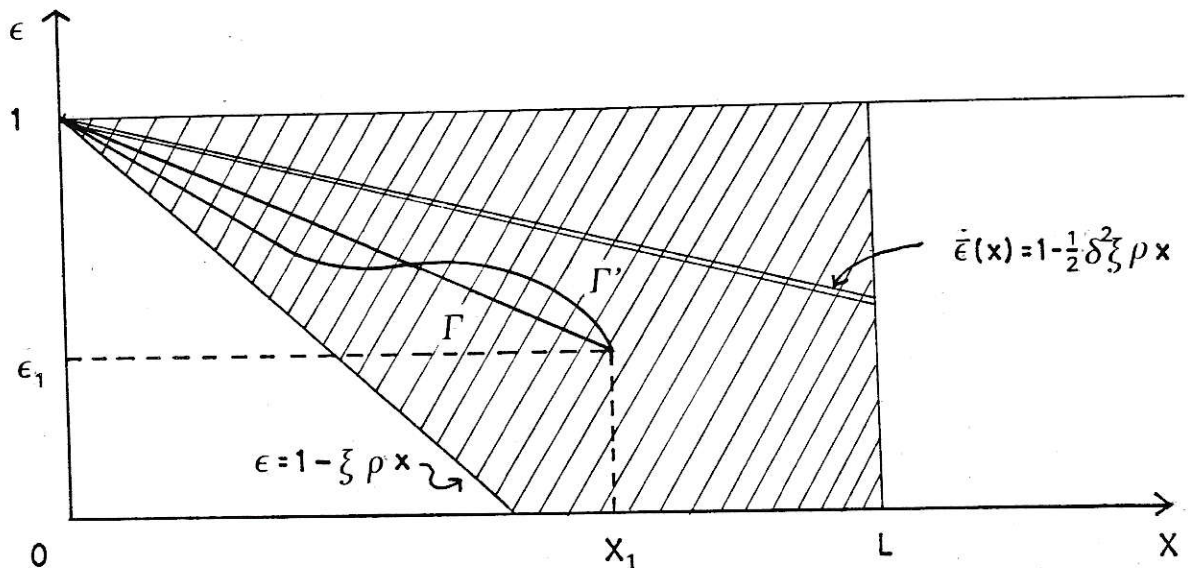


FIGURA 9: La región achurada indica, para cada valor de la posición, los posibles valores de la energía.

La línea recta $\bar{\epsilon}(x) = 1 - \frac{1}{2} \delta^2 \xi \rho x$ indica la energía más probable de la partícula cuando ésta ya ha avanzado una distancia x , mientras que las rectas $\epsilon(x) = 1$ y $\epsilon(x) = 1 - \xi \rho x$ son sus cotas superior e inferior respectivamente.

Evaluemos la fase de $a(\epsilon, x)$ en el punto (ϵ_1, x_1) . El sistema pudo llegar a ese punto de diferentes maneras. Lo más probable, sin embargo, es que el sistema hubiera evolucionado a lo largo de un camino muy cercano a Γ evitando caminos como Γ' . Por lo tanto evaluaremos la fase de $a(\epsilon, x)$ en el punto (ϵ_1, x_1) , suponiendo que el sistema evolucionó a lo largo de Γ . Esta curva está definida por la relación

$$\epsilon(x) = 1 - \frac{1 - \epsilon_1}{x_1} x. \quad (14)$$

La fase a lo largo de Γ satisface la relación

$$\varphi_{\Gamma}(x + dx) = \varphi_{\Gamma}(x) + K_0 \sqrt{\epsilon(x)} dx, \quad (15)$$

esto es

$$\frac{d\varphi_{\Gamma}(x)}{dx} = K_0 \sqrt{1 - \frac{1 - \epsilon_1}{x_1} x}. \quad (16)$$

Integrando la ecuación (16) encontramos que

$$\varphi_{\Gamma}(\epsilon_1, x_1) = \varphi_0 + \frac{2}{3} K_0 x_1 \left[\frac{1 - \epsilon_1^{3/2}}{1 - \epsilon_1} \right] \quad (17)$$

Por lo tanto, la amplitud $a(\epsilon, x)$ puede ser escrita en la forma

$$a(\epsilon, x) = \frac{e^{i\varphi_0} e^{i\frac{2}{3} K_0 x \left[\frac{1 - \epsilon^{3/2}}{1 - \epsilon} \right]}}{(\delta\xi \sqrt{\pi\epsilon\rho x})^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\frac{\epsilon - 1 + \frac{1}{2} \delta^2 \xi \rho x}{\delta\xi \sqrt{\rho x}} \right]^2 \right\}. \quad (18)$$

Si las condiciones son tales que la dispersión en energía se mantiene pequeña, entonces la distribución de energía será muy cercana a $\bar{\epsilon}(x)$ y las componentes $a(\epsilon, x)$ para diferentes energías tendrán esencialmente la misma fase. Esto nos sugiere introducir una "función de onda" que sea integrada sobre ϵ y que dependa solamente de x . La fase sería aquella de la componente $a(\bar{\epsilon}, x)$ y su magnitud vendría dada por la suma incoherente sobre ϵ , es decir,

$$\Phi(x) \approx e^{i\varphi_0} e^{i\frac{2}{3} K_0 x \left[\frac{1 - \bar{\epsilon}(x)^{3/2}}{1 - \bar{\epsilon}(x)} \right]} \left| \int_0^1 d\epsilon |a(\epsilon, x)|^2 \right|^{1/2}. \quad (19)$$

Ya que $|a(\epsilon, x)|^2$ es una Gaussiana, podemos evaluar la integral extendiendo los límites de integración a $(-\infty, +\infty)$. El resultado, con $\varphi_0 = 0$, es

$$\Phi(x) \approx \left[1 - \frac{x}{x_0} \right]^{-1/4} \exp \left\{ -i\frac{2}{3} K_0 x_0 \left[\left(1 - \frac{x}{x_0} \right)^{3/2} - 1 \right] \right\} \quad (20)$$

donde

$$x_0 =: \left[\frac{1}{2} \delta^2 \xi_p \right]^{-1}. \quad (21)$$

La distancia x_0 tiene el significado físico de ser el lugar donde, si la partícula continuara perdiendo energía a un ritmo constante, se detendría.

Partiendo de la ecuación (20), encontramos las siguientes expresiones para la densidad de probabilidad y la densidad de corriente de probabilidad:

$$\frac{\rho(x)}{\rho(0)} = \frac{|\Phi(x)|^2}{|\Phi(0)|^2} = \frac{1}{\left(1 - \frac{x}{x_0}\right)^{1/2}} \quad (22)$$

$$J = \frac{\hbar}{m_0} \operatorname{Im} \left[\Phi^* \frac{d\Phi}{dx} \right] = \frac{\hbar K_0}{m_0} \quad (23)$$

La corriente J es independiente de x y t . Recordemos que L , esto es la región donde hay fricción, debe ser menor que x_0 .

La "función de onda" (20) es solución de la siguiente ecuación:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + K_0^2 - U(x) \right] \Phi(x) = 0 \quad (24)$$

donde

$$U(x) = K_0^2 \left[\frac{x}{x_0} + \frac{5}{16} \frac{1}{(x_0 K_0)^2} \cdot \frac{1}{\left(1 - \frac{x}{x_0}\right)^2} \right] \quad (25)$$

Para $K_0 x_0 \gg 1$, $U(x)$ esencialmente es un potencial lineal:

$$U(x) \approx K_0^2 \frac{x}{x_0} \quad (26)$$

i.e., para $K_0 x_0 \gg 1$, la función de onda de una partícula libre moviéndose bajo la influencia de fricción constante es la misma que la de una partícula sin fricción moviéndose en un potencial linealmente creciente. (Lo mismo es cierto en mecánica clásica).

La "función de onda" (20) es idéntica a la parte incidente de la forma asintótica de la función de Airy, que es la solución cuántica correspondiente al problema de una partícula moviéndose en un potencial lineal.

Volviendo a la figura N° 6, en la región $x < 0$ la función de onda está dada por $\Phi_I(x) = e^{iK_0 x}$. En la región $0 < x < L$ está dada por

$$\Phi_{II}(x) = c \left[1 - \frac{x}{x_0} \right]^{-1/4} \exp \left\{ -i \frac{2}{3} K_0 x_0 \left[\left(1 - \frac{x}{x_0} \right)^{3/2} - 1 \right] \right\}. \quad (27)$$

En $x = 0$, si no hay ondas reflejadas, $\Phi_I(0) = \Phi_{II}(0)$.

Esto implica que $c = 1$. Qué hay respecto de la derivada $d\Phi(x)/dx$? En $x = 0$ encontramos

$$\left. \frac{d\Phi_I(x)}{dx} \right|_{x=0} = iK_0 \quad \text{y} \quad \left. \frac{d\Phi_{II}(x)}{dx} \right|_{x=0} = iK_0 \left[1 - \frac{i}{4K_0 x_0} \right] \quad (28)$$

De las expresiones (28) encontramos que las derivadas tienden a coincidir (esto es, no hay onda reflejada) si $1/4K_0 x_0 \ll 1$. En otras palabras, para poder despreciar las ondas reflejadas, aparte del requisito ϵ y δ pequeños, debe satisfacerse que $4K_0 x_0 \gg 1$. Note que $K_0 x_0 \gg 1$ implica que la longitud de onda asociada a la partícula debe ser mucho menor que x_0 , esto es la distancia sobre la cual la partícula pierde toda su energía. Como lo hemos mencionado antes, la condición $K_0 x_0 \gg 1$ significa que el sistema está dentro del régimen semiclásico.

3. Reflexión por una pared.

Supongamos que para $x < 0$ no hay fricción y que para $x > 0$ existe una fricción constante. Supongamos además que en $x = L$ está ubicada una pared infinita. Desde la izquierda incide hacia el origen una onda plana con número de onda K_0 (ver figura N° 10)

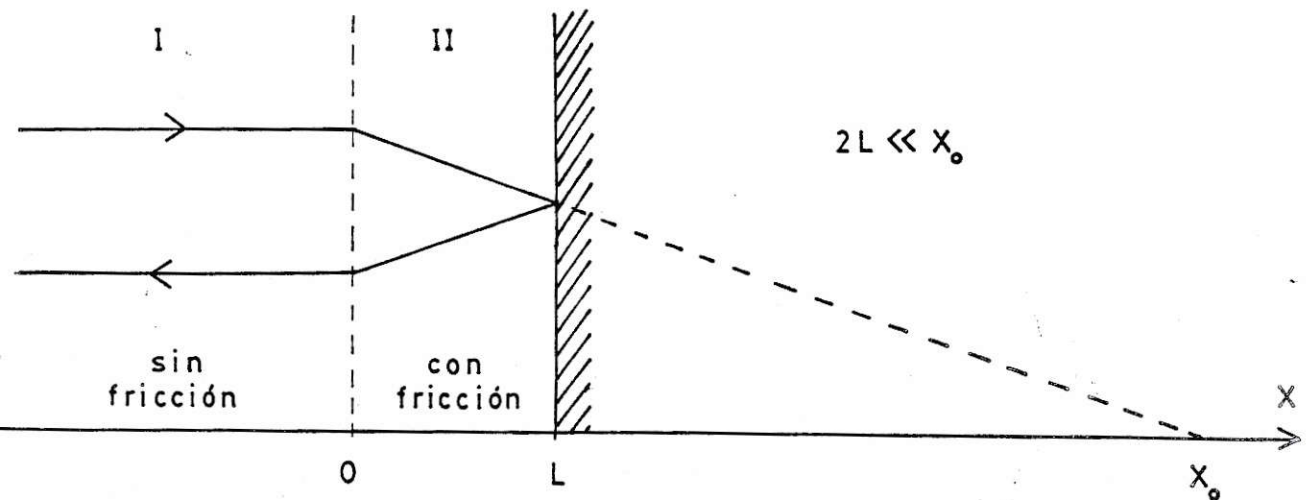


FIGURA 10: Una onda plana penetra una región con fricción y luego es reflejada por una pared infinita.

Dentro del límite continuo desarrollado en la sección anterior, tenemos que la función de onda moviéndose hacia la derecha está dada por la ecuación (20):

$$\vec{\phi}_{K_0}^{\rightarrow}(x) \quad 0 < x < L = \left[1 - \frac{x}{x_0}\right]^{-1/4} \exp \left\{ + i \frac{2}{3} K_0 x_0 \left[1 - \left[1 - \frac{x}{x_0}\right]^{3/2}\right] \right\}. \quad (29)$$

Para obtener la situación física deseada, debemos suponer que la onda reflejada va a través de un conjunto totalmente diferente de "cortes"; de lo contrario es fácil arribar a situaciones en las que el sistema gana energía reingresando a la región I a través del canal elástico, lo que de ninguna manera correspondería a lo que entendemos por fricción.

La "onda" reflejada hacia la izquierda por la muralla debería estar dada por

$$\begin{aligned} \Phi_{K_0}^{\leftarrow}(x) &= \left[1 - \frac{L - (x - L)}{x_0} \right]^{1/4} x \\ &\times \exp \left\{ + i \frac{2}{3} K_0 x_0 \left[1 - \left[1 - \frac{L - (x - L)}{x_0} \right]^{3/2} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (30)$$

Por supuesto, la "función de onda" total en la región II tiene que anularse en $X = L$ y, por lo tanto, es

$$\Phi_{K_0}^{(-)}(x) = \Phi_{K_0}^{\rightarrow}(x) - \Phi_{K_0}^{\leftarrow}(x). \quad (31)$$

Sucede que no hay una ecuación de Schrödinger del tipo (24) para la cual $\Phi_{K_0}^{(-)}(x)$ sea solución.

La conexión con otros formalismos para fricción parece imposible. La ecuación (31) corresponde a una función de onda estacionaria siendo, por lo tanto, imposible compararla con funciones de onda obtenidas a partir de un enfoque tiempo dependiente. Por otra parte, uno debería ser capaz de construir paquetes de ondas con la solución (31), esto es el

principio de superposición aún debería ser válido, lo que desecharía una comparación con los métodos desarrollados a partir de Hamiltonianos no lineales.

4. Fricción dependiente de la velocidad.

En esta sección supondremos que ξ es proporcional a $\sqrt{\epsilon}$. El problema es soluble analíticamente si en lugar de ϵ usamos $\bar{\epsilon}$. Si la dispersión en energía se mantiene angosta y la pérdida de energía no es completa, el uso de $\bar{\epsilon}$ en lugar de ϵ es una buena aproximación. Escribamos

$$\xi = \xi_0 \sqrt{\bar{\epsilon}} . \quad (32)$$

El desarrollo que sigue es paralelo al de la sección 2. De la ecuación (1) tenemos que

$$\frac{d\bar{\epsilon}}{dx} = - \frac{1}{2} \delta^2 \xi_0^2 \sqrt{\bar{\epsilon}} . \quad (33)$$

La integración de la ecuación (33) da

$$\bar{\epsilon}(x) = \left[1 - \frac{x}{x_0} \right]^2 . \quad (34)$$

Análogamente a la ecuación (4), en (34) hemos definido x_0 como la distancia donde una partícula clásica se detendría i.e. donde $\bar{\epsilon} = 0$:

$$x_0 = \left[\frac{1}{4} \delta^2 \epsilon_0 \rho \right]^{-1} . \quad (35)$$

Para el ancho encontramos que

$$w^2(x) = \delta^2 \epsilon_0^2 \rho \frac{x_0}{3} \left[1 - \left[1 - \frac{x}{x_0} \right]^3 \right] \quad (36)$$

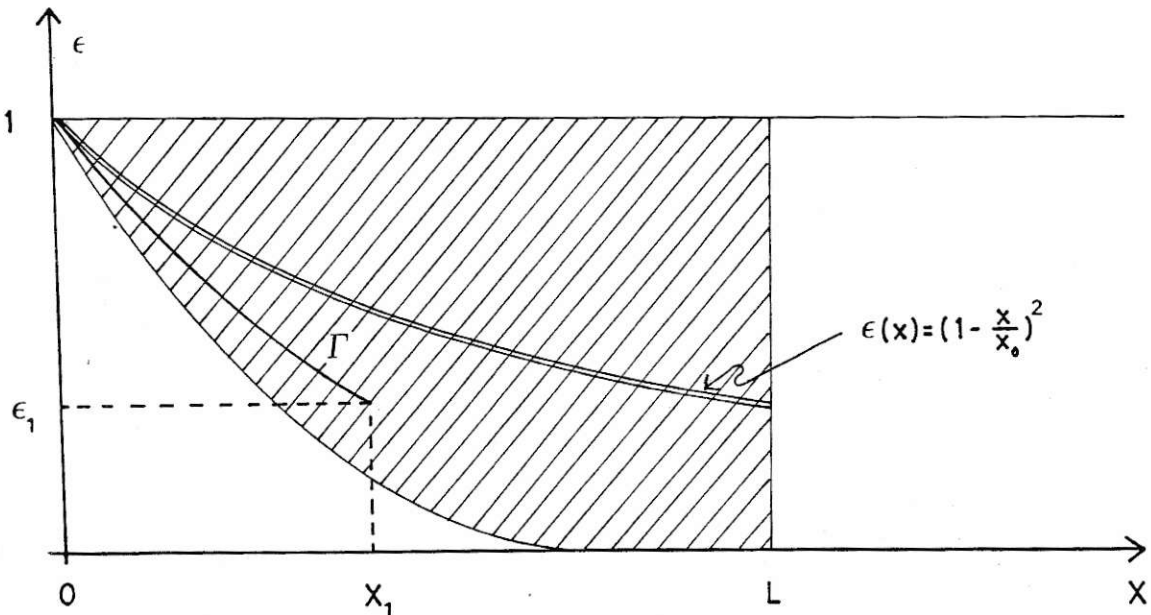


FIGURA 11: Análoga a la Figura 9, pero cuando la fricción depende de la velocidad.

La curva Γ está dada por

$$\epsilon(x) = \left[1 - (1 - \sqrt{\epsilon_1}) \frac{x}{x_1} \right]^2 . \quad (37)$$

Para la fase a lo largo de Γ uno encuentra

$$\varphi_{\Gamma}(\epsilon_1, x_1) = \varphi_0 + \frac{K_0}{2} (1 + \sqrt{\epsilon_1}) x_1 \quad (38)$$

Por lo tanto, la amplitud $a(\epsilon, x)$ se puede escribir de la forma

$$a(\epsilon, x) = \frac{e^{i\phi_0} e^{iK_0 x} \frac{1}{2} (1 + \sqrt{\epsilon})}{(\sqrt{\pi \epsilon} w(x))^{1/2}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{\epsilon - \bar{\epsilon}(x)}{w(x)} \right)^2}. \quad (39)$$

Si la dispersión en energía se mantiene pequeña podemos introducir una "función de onda" $\Phi(x)$ como en la sección 2. El resultado, con $\phi_0 = 0$, es:

$$\Phi(x) = \left[1 - \frac{x}{x_0} \right]^{-1/2} \exp \left\{ iK_0 x \left[1 - \frac{x}{2x_0} \right] \right\}. \quad (40)$$

Para la densidad de probabilidad y la corriente de partículas encontramos

$$\frac{\rho(x)}{\rho(0)} = \frac{x_0}{x_0 - x} \quad x < x_0 \quad (41)$$

y

$$J = \frac{\hbar K_0}{m_0} \quad (42)$$

La "función de onda" $\Phi(x)$ dada por (37) es solución de la ecuación de Schrödinger

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + K_0^2 - U(x) \right] \Phi(x) = 0 \quad (43)$$

con

$$U(x) = 2K_0^2 \frac{x}{x_0} \left[1 - \frac{x}{2x_0} \right]. \quad (44)$$

Definamos

$$W = -\frac{1}{2} i\hbar \ln \frac{\Phi(x)}{\Phi^*(x)} . \quad (45)$$

Reemplazando (40) en (45) encontramos

$$W(x) = \hbar K_0 x \left[1 - \frac{x}{2x_0} \right] = \frac{\hbar x_0}{2K_0} U(x) , \quad (46)$$

esto es, podemos escribir la "ecuación de Schrödinger" (43) en la forma

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} + \gamma W(x) \right] \Phi(x) = E\Phi(x) \quad (47)$$

con

$$\gamma = \left[\frac{\hbar K_0}{m_0} \right] \frac{1}{x_0} = \frac{\hbar K_0}{m_0} \frac{1}{4} \delta^2 \xi_0 \rho . \quad (48)$$

y $W(x)$ dado por la ecuación (45). El paréntesis cuadrado en la ecuación (47) es similar al Hamiltoniano no lineal de Kostin para fricción proporcional a la velocidad. La principal diferencia es que en (47) la energía E es la energía total del sistema (incluyendo la energía traspasada a los osciladores) mientras que en el Hamiltoniano de Kostin E es sólo la energía de la partícula. Note que la ecuación (47) no tiene el término $\langle \ln \psi/\psi^* \rangle$, presente en el Hamiltoniano de Kostin.

Es fácil ver que γ es la constante de fricción de la ecuación clásica

$$m_0 \ddot{x} + \gamma \dot{x} = 0 \quad (49)$$

CAPITULO IV

PENETRACION A TRAVES DE UNA BARRERA CUADRADA EN PRESENCIA DE UN CORTE-OSCILADOR ARMONICO

En este capítulo estaremos interesados en las soluciones estacionarias de la siguiente ecuación de Schrödinger:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{C}{2} (y - y^{(0)}(x))^2 + V(x) - \left[E_0 + \frac{\hbar\omega_0}{2} \right] \right] \phi(x, y) = 0, \quad (1)$$

donde

$$y^{(0)}(x) = \begin{cases} 0 & x < x_1 \\ y_0 & x > x_1 \end{cases} \quad x_1 \in]0, L[\quad (2)$$

y

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0, \quad x > L \\ V_0 & 0 < x < L \end{cases} \quad (3)$$

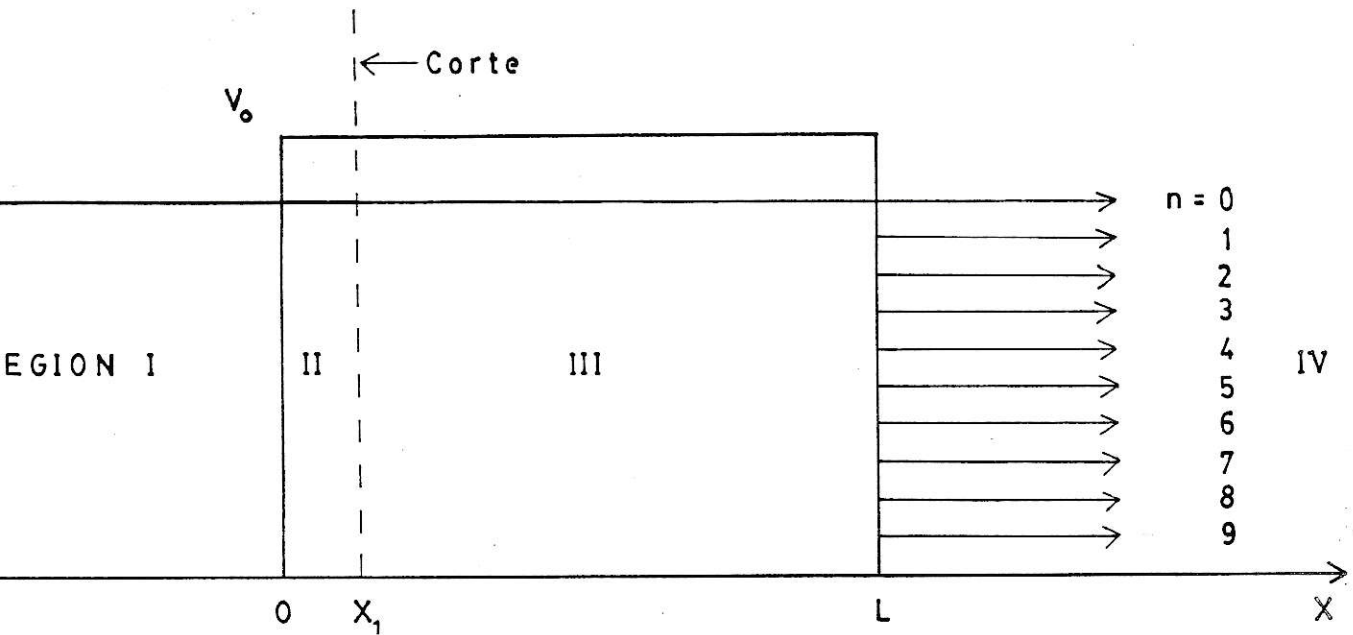


FIGURA 12: Penetración a través de una barrera que tiene un corte en $x = x_1$.

Estudiamos el caso para el cual $E_0 < V_0$. La Figura 12 muestra esquemáticamente la situación descrita por la ecuación de Schrödinger (1).

Definamos los vectores de onda en las regiones I y IV por

$$k_n^2 = k_0^2(1 - \xi n) \quad n \in \mathbb{N}^* \quad (4)$$

donde ξ está dado por (I-31). Bajo la barrera (en las regiones II y III) introducimos

$$\kappa_n^2 = k_0^2(\tilde{V}_0 - 1 + \xi n) \quad n \in \mathbb{N}^* \quad (5)$$

donde

$$\tilde{V}_0 = \frac{V_0}{E_0} = \frac{2m_0 V_0}{\hbar^2 K_0^2} \quad (6)$$

Para simplificar lo que sigue, supondremos que los canales cerrados (esto es aquellos que tienen energías negativas en las regiones I y IV) pueden ser despreciados. En ese caso las soluciones generales en las regiones I-IV están dadas por

$$|\psi_I(x)\rangle = \sum_n (a_n^{\rightarrow} e^{iK_n x} + a_n^{\leftarrow} e^{-iK_n x}) |n\rangle \quad (7)$$

$$|\psi_{II}(x)\rangle = \sum_n (b_n^{\uparrow} e^{\kappa_n(x-x_1)} + b_n^{\downarrow} e^{-\kappa_n(x-x_1)}) |n\rangle \quad (8)$$

$$|\psi_{III}(x)\rangle = \sum_n (c_n^{\uparrow} e^{\kappa_n(x-x_1)} + c_n^{\downarrow} e^{-\kappa_n(x-x_1)}) |n\rangle \quad (9)$$

$$|\psi_{IV}(x)\rangle = \sum_n (d_n^{\rightarrow} e^{iK_n(x-L)} + d_n^{\leftarrow} e^{-iK_n(x-L)}) |\bar{n}\rangle \quad (10)$$

Para los valores $x = 0$, $x = x_1$ y $x = L$ la función de onda y su derivada deben ser continuas para todo y . Esto da las siguientes relaciones entre los coeficientes:

$$\begin{pmatrix} a_0^{\rightarrow} \\ \vdots \\ a_N^{\rightarrow} \\ a_0^{\leftarrow} \\ \vdots \\ a_N^{\leftarrow} \end{pmatrix} = \mathbb{M} \begin{pmatrix} b_0^{\uparrow} \\ \vdots \\ b_N^{\uparrow} \\ b_0^{\downarrow} \\ \vdots \\ b_N^{\downarrow} \end{pmatrix} \quad (11)$$

donde \mathbb{M} es una matriz de $2N \times 2N$ (N es el valor más grande de n incluido en el cálculo) dada por

$$\mathbb{M} = \begin{array}{c} \left[\begin{array}{c|c} \frac{1}{2} e^{-\kappa_n x_1} \left[1 - i \frac{\kappa_n}{\kappa_n} \right] \delta_{nm} & \frac{1}{2} e^{\kappa_n x_1} \left[1 + i \frac{\kappa_n}{\kappa_n} \right] \delta_{nm} \\ \hline \frac{1}{2} e^{-\kappa_n x_1} \left[1 + i \frac{\kappa_n}{\kappa_n} \right] \delta_{nm} & \frac{1}{2} e^{\kappa_n x_1} \left[1 - i \frac{\kappa_n}{\kappa_n} \right] \delta_{nm} \end{array} \right] \end{array} \quad (12)$$

(cada uno de los "cuadrantes" de \mathbb{M} es una matriz diagonal de $N \times N$),

$$\begin{array}{c} \left[\begin{array}{c} b_0^\dagger \\ \vdots \\ b_N^\dagger \\ b_0^\downarrow \\ \vdots \\ b_N^\downarrow \end{array} \right] = \mathbb{C} \left[\begin{array}{c} c_0^\dagger \\ \vdots \\ c_N^\dagger \\ c_0^\downarrow \\ \vdots \\ c_N^\downarrow \end{array} \right] \end{array} \quad (13)$$

donde \mathbb{C} es una matriz de $N \times N$ dada por

$$\mathbb{C} = \begin{array}{c} \left[\begin{array}{c|c} \langle m|\bar{n}\rangle \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\kappa_n}{\kappa_m} \right] & \langle m|\bar{n}\rangle \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\kappa_n}{\kappa_m} \right] \\ \hline \langle m|\bar{n}\rangle \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\kappa_n}{\kappa_m} \right] & \langle m|\bar{n}\rangle \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\kappa_n}{\kappa_m} \right] \end{array} \right] \end{array} \quad (14)$$

y

$$\begin{pmatrix} c_0^\dagger \\ \vdots \\ c_N^\dagger \\ c_0^\dagger \\ \vdots \\ c_N^\dagger \end{pmatrix} = \mathbb{N} \begin{pmatrix} d_0^\dagger \\ \vdots \\ d_N^\dagger \\ d_0^\dagger \\ \vdots \\ d_N^\dagger \end{pmatrix} \quad (15)$$

donde \mathbb{N} es una matriz de $2N \times 2N$ dada por

$$\mathbb{N} = \left[\begin{array}{c|c} \frac{1}{2} e^{-\kappa_n(L-x_1)} \left[1 + i \frac{\kappa_n}{\kappa_n} \right] \delta_{nm} & \frac{1}{2} e^{-\kappa_n(L-x_1)} \left[1 - i \frac{\kappa_n}{\kappa_n} \right] \delta_{nm} \\ \hline \frac{1}{2} e^{\kappa_n(L-x_1)} \left[1 - i \frac{\kappa_n}{\kappa_n} \right] \delta_{nm} & \frac{1}{2} e^{\kappa_n(L-x_1)} \left[1 + i \frac{\kappa_n}{\kappa_n} \right] \delta_{nm} \end{array} \right] \quad (16)$$

A partir de las ecuaciones (11), (13) y (15) encontramos que

$$\begin{pmatrix} a_0^\rightarrow \\ \vdots \\ a_N^\rightarrow \\ a_0^\leftarrow \\ \vdots \\ a_N^\leftarrow \end{pmatrix} = \mathbb{M} \mathbb{C} \mathbb{N} \begin{pmatrix} d_0^\rightarrow \\ \vdots \\ d_N^\rightarrow \\ d_0^\leftarrow \\ \vdots \\ d_N^\leftarrow \end{pmatrix} = \mathbb{S} \begin{pmatrix} d_0^\rightarrow \\ \vdots \\ d_N^\rightarrow \\ d_0^\leftarrow \\ \vdots \\ d_N^\leftarrow \end{pmatrix}, \quad (17)$$

donde

$$S =: \text{MCIN} = \begin{bmatrix} s(1) & | & s(2) \\ \hline s(3) & | & s(4) \end{bmatrix} \quad (18)$$

Aplicamos ahora las condiciones asintóticas sobre los coeficientes.

En la región IV deseamos solo ondas emergentes, es decir, requerimos

$$d_n^+ = 0 \quad \forall n. \quad (19)$$

En la región I imponemos una onda incidente sólo en el canal $n = 0$ (adicionalmente aquí habrá ondas emergentes en todos los canales, resultado del problema de scattering), es decir, imponemos

$$a_n^+ = \delta_{n0}. \quad (20)$$

Sea Φ_ν la solución de (1) que satisface las condiciones de borde

$$\begin{cases} d_\mu^+ = \delta_{\nu\mu} \\ d_\mu^- = 0 \end{cases} \quad \forall \mu \quad (21)$$

La solución ψ , que satisface las condiciones asintóticas (19) y (20) es una superposición lineal de las funciones Φ_ν

$$\psi = \sum_{\nu=0}^N \alpha_\nu \Phi_\nu. \quad (22)$$

Se tiene

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vec{a}_0 \\ \vdots \\ \vec{a}_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s(1) & | & s(2) \\ \hline s(3) & | & s(4) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \alpha_N \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (24)$$

En particular

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = s(1) \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \alpha_N \end{pmatrix} \quad (25)$$

y

$$\begin{pmatrix} \vec{a}_0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vec{a}_N \end{pmatrix} = s(3) \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \alpha_N \end{pmatrix} \quad (26)$$

Los coeficientes de expansión $\{\alpha_\nu\}$ se encuentran invirtiendo la ecuación (25). Una vez que los coeficientes $\{\alpha_\nu\}$ han sido encontrados, entonces la ecuación (26) nos permite calcular los coeficientes $\{\vec{a}_\mu\}$.

Los flujos transmitidos y reflejados t_n y r_n para cada canal, con el flujo incidente normalizado a uno, están dados por

$$t_n = |\alpha_n|^2 \frac{K_n}{K_0} \quad (27)$$

y

$$r_n = |\bar{\alpha}_n|^2 \frac{K_n}{K_0} \quad (28)$$

La conservación del flujo de partículas da

$$\sum_{n=0}^N \frac{K_n}{K_0} (|\alpha_n|^2 + |\bar{\alpha}_n|^2) = 1 \quad (29)$$

En el problema de penetración bajo una barrera, aparte de ξ , δ y \tilde{V}_0 , aparecen otros 2 parámetros adimensionales. Ellos pueden ser definidos de la siguiente manera:

$$\zeta = K_0(L - x_1) \quad (30)$$

$$\eta = K_0 x_1 \quad (31)$$

Vemos que

$$\eta + \zeta = K_0 L = 2\pi \frac{L}{\lambda_0} \quad (32)$$

esencialmente es la razón entre el ancho de la barrera y la longitud de onda incidente, mientras que

$$\frac{\eta}{\eta + \zeta} = \frac{x_1}{L} \quad (33)$$

es la posición del corte dentro de la barrera.

A continuación damos algunos resultados numéricos para el caso $\tilde{V}_0 = V_0/E_0 = 1.2$, $\eta = 0.5$ y $\zeta = 3.5$.

Por supuesto, para $\delta = 0$ uno tiene solamente ondas transmitidas y reflejadas en el canal $n = 0$. Para este caso uno encuentra $r_0 = 0.93834$ y $t_0 = 0.06166$.

Tabla I da los resultados para las ondas transmitidas y reflejadas en cada canal para $\delta = 1$ y para los siguientes valores de ξ : 0.1, 0.05 y 0.

TABLA I

Canal n	$\xi = 0.1$		$\xi = 0.05$		$\xi = 0$	
	r_n	t_n	r_n	t_n	r_n	t_n
0	.94622	.03748	.94380	.03742	.93834	.03740
1	.00278	.01150	.00085	.01464	.00000	.01870
2	.00002	.00180	.00000	.00288		.00467
3		.00019		.00039		.00078
4		.00001		.00004		.00010
5						.00000
Total	.94902	0.05098	.94465	.05535	.93834	.06166

De la tabla I uno encuentra, como se espera, que la onda total transmitida decrezca a medida que ξ aumenta. Esto es debido a la altura adicional que las partículas en los canales con $n \neq 0$ tienen que penetrar en la barrera cuando ξ (que está relacionado a la pérdida de energía en el corte) aumenta.

Las ondas reflejadas en los canales no elásticos decrece dramáticamente cuando $\xi \rightarrow 0$. De alguna manera se repite la situación que teníamos en el Capítulo I. Para $\xi \rightarrow 0$ es claro que los cortes no generarán flujo reflejado.

Una gran cantidad de flujo de partículas es reflejado en el frente de la barrera, pero parece posible, ensamblando bien las funciones de onda en la parte posterior de la barrera, tener reflexión despreciable desde $x = L$. Estos resultados nos permiten proceder de una manera similar al Capítulo II y de esta manera simular fricción durante el proceso de penetración de una barrera.

CAPITULO V

SIMULACION DE FRICCION EN EL PROCESO DE PENETRACION BAJO UNA BARRERA

En este capítulo seguimos estrechamente las ideas ya usadas en el capítulo II .

Introduzcamos N grados de libertad, cada uno para un corte oscilador armónico. La ecuación de Schrödinger en la que estamos interesados es

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \sum_{n=1}^N \left[\frac{-\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial y_n^2} + \frac{C}{2} (y_n - y_n^{(0)}(x))^2 \right] + V(x) + \right. \\ \left. + (-1) \left(E_0 + \frac{N}{2} \hbar \omega_0 \right) \right] \psi(x, y_1, \dots, y_N) = 0 . \quad (1)$$

(A menos que se indique lo contrario, usamos la notación y definiciones de los capítulos previos).

$$y_n^{(0)}(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < x_n \\ \Delta & \text{si } x > x_n \end{cases} \quad (2)$$

Todos los cortes estarán ubicados en la región de la barrera, esto es $0 < x < L \quad \forall n$ (vea figura 13).

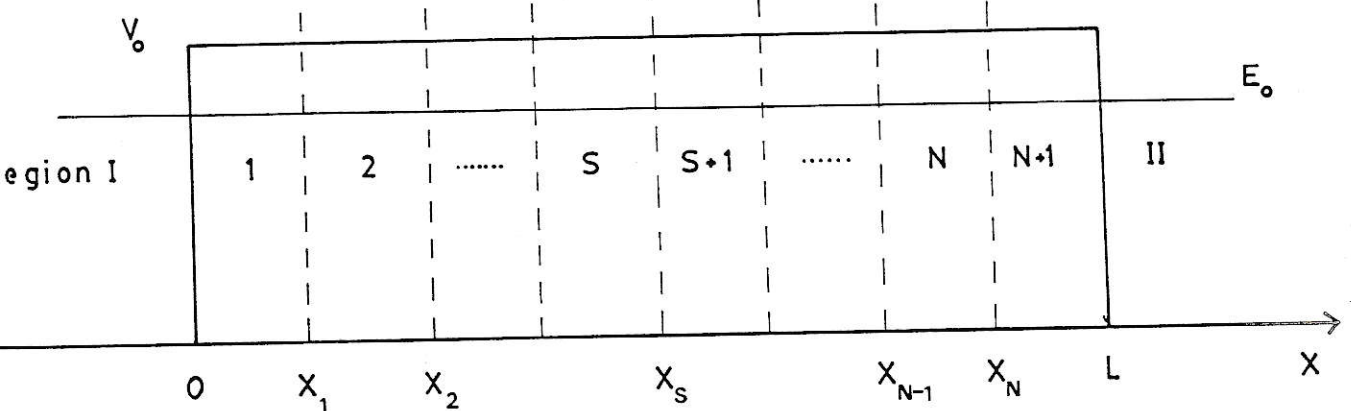


FIGURA 13.

Estaremos interesados solamente en el caso en que E_0 es menor que V_0 . Por experiencia de los capítulos previos, E_0 no debe estar cerca de 0 ni de V_0 .

Ya que bajo la barrera no hay ondas que viajan, no es inmediatamente obvio cuál es la aproximación análoga a desprestigiar las ondas reflejadas. Por esta razón, cuando escribamos las funciones de onda en las diferentes regiones debemos incluir todas las ondas tanto exponencialmente crecientes como decrecientes.

Una onda monocromática se mueve desde la izquierda (región I) hacia la barrera. A la izquierda del primer corte solamente habrá ondas en el canal elástico ($n = 0$). En las regiones 1, 2 y 3 bajo la barrera, la función de onda estará dada por

$$|\psi^1(x)\rangle_{0 < x < x_1} = (a_0^\dagger(1) e^{\kappa_0(x-x_1)} + a_0^\downarrow(1) e^{-\kappa_0(x-x_1)}) \prod_{n=1}^N |0\rangle_n \quad (3)$$

$$|\psi^2(x)\rangle_{x_1 < x < x_2} = \sum_v (a_v^\dagger(2) e^{\kappa_v(x-x_2)} + a_v^\downarrow(2) e^{-\kappa_v(x-x_2)}) |\bar{v}\rangle_1 \prod_{n=2}^N |0\rangle_n \quad (4)$$

y

$$|\psi^3(x)\rangle = \sum_{\nu\mu} (b_{\nu\mu}^\dagger(3) e^{\kappa_{\nu+\mu}(x-x_3)} + b_{\nu\mu}^\downarrow(3) e^{-\kappa_{\nu+\mu}(x-x_3)}) \cdot |\bar{\nu}\rangle_1 |\bar{\mu}\rangle_2 \prod_{n=3}^N |0\rangle_n \quad x_2 < x < x_3 \quad (5)$$

En $x = x_2$ debemos tener

$$\begin{cases} \psi^2(x_2, y_1, y_2, \dots, y_N) = \psi^3(x_2, y_1, y_2, \dots, y_N) & (6a) \\ \left. \frac{\partial \psi^2}{\partial x} \right|_{x=x_2} = \left. \frac{\partial \psi^3}{\partial x} \right|_{x=x_2} \quad \forall y_1, y_2, \dots, y_N & (6b) \end{cases}$$

De las ecuaciones (6a) y (6b) encontramos

$$b_{\nu\mu}^\dagger(3) = \frac{1}{2} e^{-\kappa_{\nu+\mu}(x_2-x_3)} \Gamma_\mu \left[a_v^\dagger(2) \left[1 + \frac{\kappa_v}{\kappa_{\nu+\mu}} \right] + a_v^\downarrow(2) \left[1 - \frac{\kappa_v}{\kappa_{\nu+\mu}} \right] \right] \quad (7)$$

y

$$b_{\nu\mu}^\downarrow(3) = \frac{1}{2} e^{\kappa_{\nu+\mu}(x_2-x_3)} \Gamma_\mu \left[a_v^\dagger(2) \left[1 - \frac{\kappa_v}{\kappa_{\nu+\mu}} \right] + a_v^\downarrow(2) \left[1 + \frac{\kappa_v}{\kappa_{\nu+\mu}} \right] \right] \quad (8)$$

Si en las ecuaciones previas $\kappa_v/\kappa_{\nu+\mu}$ es reemplazada por 1, entonces las ondas exponencialmente crecientes y decrecientes se desacoplan (esto es equivalente a desprestigiar las ondas reflejadas para $E > V_0$). La razón

$$\frac{\kappa_\nu}{\kappa_{\nu+\mu}} \xrightarrow{\xi \rightarrow 0} 1 \quad (9)$$

De la misma forma que en el capítulo II, simularemos fricción haciendo que la onda vaya a través de muchos cortes y decreciendo ξ a medida que el número de cortes aumenta. Para $\xi \ll 1$ las ecuaciones (7) y (8) llegan a ser:

$$\left\{ \begin{array}{l} b_{\nu\mu}^\uparrow(3) = e^{-\kappa_{\nu+\mu}(x_2-x_3)} \Gamma_\mu a_\nu^\uparrow(2) \\ b_{\nu\mu}^\downarrow(3) = e^{\kappa_{\nu+\mu}(x_2-x_3)} \Gamma_\mu a_\nu^\downarrow(2) \end{array} \right. \quad (10)$$

$$(11)$$

Es muy importante notar que las ondas exponencialmente crecientes (decrecientes) están relacionadas solamente a la onda crecientes (decrecientes) en la región previa.

Igual que en el capítulo II nos gustaria reducir la función de onda de tal manera de retener sólo la información relevante. En ese caso obtenemos que la función de onda en la región 3 puede ser escrita como

$$|\psi^{(3)}(x)\rangle = \sum_\nu (a_\nu^\uparrow(3) e^{\kappa_\nu(x-x_3)} + a_\nu^\downarrow(3) e^{-\kappa_\nu(x-x_3)}) |\bar{\nu}\rangle_{12} \prod_{n=3}^N |0\rangle_n \quad (12)$$

donde $a_v^{\uparrow(3)}$ ($a_v^{\downarrow(3)}$) se encuentra usando la siguiente prescripción

$$|a_v^{\uparrow(3)}|^2 = \sum_{\mu \leq v} |b_{v-\mu, \mu}^{(2)}|^2 \quad (13)$$

(una relación análoga es válida para las ondas exponencialmente decayentes)

Ya que los factores que relacionan las amplitudes en dos regiones vecinas son reales (debido a la elección hecha previamente para los autoestados del oscilador armónico), encontramos que todas las amplitudes tienen la misma fase, esto es

$$(\text{fase de } a_v^{\uparrow(j)}) = (\text{fase de } a_0^{\uparrow(1)}) \quad (14a)$$

$$(\text{fase de } a_v^{\downarrow(j)}) = (\text{fase de } a_0^{\downarrow(j)}) . \quad (14b)$$

A partir de las ecuaciones (13) y (10) encontramos

$$|a_v^{\uparrow(s+1)}|^2 = \sum_{\mu \leq v} e^{-2\kappa_v(x_{v+1}-x_v)} \Gamma_{\mu}^2 |a_{v-\mu}^{\uparrow(s)}|^2 \quad (15a)$$

$$|a_v^{\downarrow(s+1)}|^2 = \sum_{\mu \leq v} e^{2\kappa_v(x_{v+1}-x_v)} \Gamma_{\mu}^2 |a_{v-\mu}^{\downarrow(s)}|^2 . \quad (15b)$$

Ahora debemos aplicar las condiciones de borde en $x = 0$ y en $x = L$. En la región I buscaremos una función de onda del tipo

$$|\psi^{(I)}(x)\rangle = \left[e^{iK_0 x} + a_0^{-(I)} e^{-iK_0 x} \right] \prod_{n=0}^N |0\rangle_n . \quad (16)$$

La continuidad de la función de onda y su derivada en $x = 0$ da las siguientes relaciones:

$$a_v^{\uparrow(1)} = a_v^{\downarrow(1)} = 0 \quad \forall v \neq 0 \quad (17)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{a}_0^{(I)} = 1 = \frac{1}{2} e^{-\kappa_0 x_1} \left[1 + \frac{\kappa_0}{iK_0} \right] a_0^{\uparrow(1)} + \frac{1}{2} e^{\kappa_0 x_1} \left[1 - \frac{\kappa_0}{iK_0} \right] a_0^{\downarrow(1)} \end{array} \right. \quad (18)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \overleftarrow{a}_0^{(I)} = \frac{1}{2} e^{-\kappa_0 x_1} \left[1 - \frac{\kappa_0}{iK_0} \right] a_0^{\uparrow(1)} + \frac{1}{2} e^{\kappa_0 x_1} \left[1 + \frac{\kappa_0}{iK_0} \right] a_0^{\downarrow(1)} \end{array} \right. \quad (19)$$

En la región II la función de onda tiene la forma

$$|\psi^{II}(x)\rangle = \sum_v \left[\vec{a}_v^{(II)} e^{iK_v(x-L)} + \overleftarrow{a}_v^{(II)} e^{-iK_v(x-L)} \right] |\vec{v}\rangle_{1, \dots, N} \quad (20)$$

La continuidad de la función y su derivada en $x = L$ da las siguientes relaciones:

$$\left\{ \begin{array}{l} a_v^{\uparrow(N+1)} = \frac{1}{2} \left[1 + i \frac{K_v}{\kappa_v} \right] a_v^{\rightarrow(II)} + \frac{1}{2} \left[1 - \frac{iK_v}{\kappa_v} \right] a_v^{\leftarrow(II)} \end{array} \right. \quad (21)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} a_v^{\downarrow(N+1)} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{iK_v}{\kappa_v} \right] a_v^{\rightarrow(II)} + \frac{1}{2} \left[1 + \frac{iK_v}{\kappa_v} \right] a_v^{\leftarrow(II)} \end{array} \right. \quad (22)$$

Sean n^\uparrow y n^\downarrow el número del canal para el cual $|a_n^{\uparrow(N+1)}|$ y $|a_n^{\downarrow(N+1)}|$ son máximos. Definimos al canal de salida más probable por

$$n_0 = \frac{1}{2} (n^\uparrow + n^\downarrow) \quad (23)$$

(Si n_0 es un semi-entero, usar el entero siguiente).

Con la elección (16) para la onda reflejada, disponemos solamente de un grado de libertad. Sólo una de las amplitudes incidentes $a_v^{\leftarrow(II)}$

puede ser elegida igual a cero. Escogemos las condiciones de borde de una forma tal que no haya presente onda incidiendo desde la derecha hacia la barrera para el canal n_0 , i.e.

$$a_{n_0}^{-(II)} = 0 \quad (24)$$

Usando las ecuaciones (20) y (21) encontramos que la razón de $a_{n_0}^{\uparrow(N+1)}$ y $a_{n_0}^{\downarrow(N+1)}$

$$\frac{a_{n_0}^{\uparrow(N+1)}}{a_{n_0}^{\downarrow(N+1)}} = \frac{1 + iK_{n_0}/\kappa_{n_0}}{1 - iK_{n_0}/\kappa_{n_0}} = - \frac{1 - i\kappa_{n_0}/K_{n_0}}{1 + i\kappa_{n_0}/K_{n_0}} = - \frac{\delta_{n_0}^*}{\delta_{n_0}} \quad (25)$$

donde se ha usado la notación

$$\delta_v =: \frac{1}{2} \left[1 + i \frac{\kappa_v}{K_v} \right] \quad (26)$$

Todas las amplitudes $a_v^{\downarrow(s)}$ de las ondas exponencialmente decrecientes son generadas a partir de una sola amplitud $a_0^{\downarrow(1)}$; de hecho entre ellas existe una proporcionalidad directa. Lo mismo es cierto para las amplitudes $a_v^{\uparrow(s)}$ que corresponden a las ondas exponencialmente crecientes; ellas son directamente proporcional a $a_0^{\uparrow(1)}$. Por lo tanto la razón (25) determina también la razón de $a_0^{\uparrow(1)}$ y $a_0^{\downarrow(1)}$.

A continuación enumeramos brevemente los pasos seguidos para encontrar las amplitudes:

- i) Introduzcamos las amplitudes provisionarias $\{\tilde{a}_v^\uparrow(s)\}$ y $\{\tilde{a}_v^\downarrow(s)\}$.
Comenzamos los cálculos numéricos en la región 1 con las condiciones iniciales

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{a}_0^\uparrow(1) e^{-\kappa_0 x_1} = 1 \\ \tilde{a}_0^\downarrow(1) e^{\kappa_0 x_1} = 1 \\ \tilde{a}_v^\uparrow(1) = \tilde{a}_v^\downarrow(1) = 0 \quad \forall v \neq 0 \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (27a) \\ (27b) \\ (27c) \end{array}$$

- ii) Usamos las ecuaciones (14) y (15) para encontrar las amplitudes provisionarias en todas las regiones. En particular encontramos

$$\tilde{a}_v^\uparrow(N+1) \quad \text{y} \quad \tilde{a}_v^\downarrow(N+1) \quad \forall v.$$

- iii) Encontramos n_0 , el canal de salida más probable y evaluamos la re zón

$$\frac{\tilde{a}_{n_0}^\uparrow(N+1)}{\tilde{a}_{n_0}^\downarrow(N+1)} =: \Gamma \quad (28)$$

- iv) Hemos encontrado que

$$\frac{\tilde{a}_0^\uparrow(1) e^{-\kappa_0 x_1}}{\tilde{a}_0^\downarrow(1) e^{\kappa_0 x_1}} = 1 \xrightarrow{\text{da}} \frac{\tilde{a}_{n_0}^\uparrow(N+1)}{\tilde{a}_{n_0}^\downarrow(N+1)} = \Gamma \quad (29)$$

Por lo tanto, si comenzamos con

$$\frac{a_0^{\uparrow(1)} e^{-\kappa_0 x_1}}{a_0^{\downarrow(1)} e^{\kappa_0 x_1}} = \frac{1}{\Gamma} \left[-\frac{\delta_{n_0}^*}{\delta_{n_0}} \right] =: R \quad (30)$$

encontraremos que se satisface la ecuación (24).

v) La ecuación (30), junto con (18) y (19) da

$$a_0^{\uparrow(1)} e^{-\kappa_0 x_1} = \frac{R}{\delta_0^* R + \delta_0} \quad (31)$$

$$a_0^{\downarrow(1)} e^{\kappa_0 x_1} = \frac{1}{\delta_0^* R + \delta_0} \quad (32)$$

y

$$a_0^{\leftarrow(I)} = \frac{\delta_0 R + \delta_0^*}{\delta_0^* R + \delta_0} \quad (33)$$

vi) A partir de las ecuaciones (27a) y (31) encontramos que

$$a_v^{\uparrow(N+1)} = \frac{R}{\delta_0^* R + \delta_0} \tilde{a}_v^{\uparrow(N+1)} \quad \forall v \quad (34)$$

$$a_v^{\downarrow(N+1)} = \frac{1}{\delta_0^* R + \delta_0} \tilde{a}_v^{\downarrow(N+1)} \quad \forall v \quad (35)$$

vii) Una vez que las amplitudes $a_v^{\uparrow(N+1)}$ y $a_v^{\downarrow(N+1)}$ son conocidas, entonces las ecuaciones (21) y (22) dan las amplitudes $a_v^{\rightarrow(II)}$ y $a_v^{\leftarrow(II)}$ en la región II.

Solamente en el canal $v = n_0$ no habrá ondas moviéndose hacia la barrera en la región II. A medida que la diferencia entre v y n_0 de crece, la fracción de ondas que se mueven hacia la barrera con respecto a las ondas que se alejan (en la región II), aumentará.

De ninguna manera éste es el problema físico que uno tenía en mente al comienzo sino que es el precio que uno tiene que pagar por despreciar las ondas reflejadas en todos los canales no-elásticos de la región I (vea ecuación (16)). Un ejemplo numérico mostrará que la situación no es tan mala y que es fácil construir casos en que el método descrito es una buena aproximación.

A continuación mostramos resultados numéricos para el siguiente caso: $K_0 L = 8$ y $\tilde{V}_0 = V_0/E = 2.0$.

La situación descrita está representada en la figura 14.

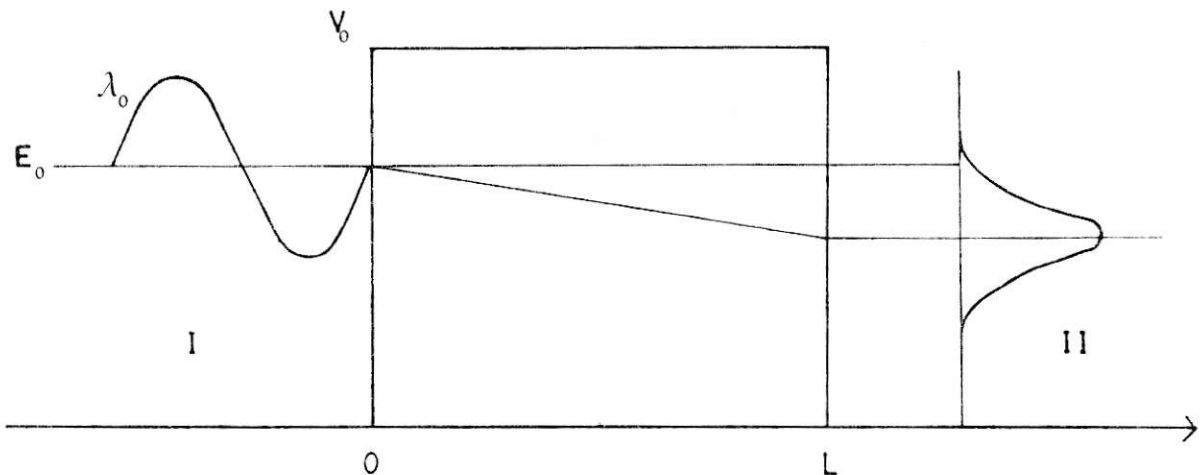


FIGURA 14.

Si la constante de acoplamiento es $\delta = 0$, entonces la probabilidad de penetración de la barrera es $P = 4.50 \times 10^{-7}$. Esto coincide con el valor dado por la fórmula

$$P = \frac{16}{\bar{V}_0} \left[1 - \frac{1}{\bar{V}_0} \right] e^{-2\kappa_0 L} \quad (36)$$

que da la probabilidad de penetración para el problema unidimensional en el límite de penetrabilidad pequeña.

La figura 15 da la probabilidad de que podamos encontrar a las diferentes ondas en región II para los diferentes canales n . Para el caso $N = 100$ (es decir las líneas sólidas) la escala n va desde 0 a 35 mientras que para los cálculos con 200 cortes la escala n va desde 0 a 70. Ya que para estos cálculos $N\xi = 2$, se ve que el canal de salida más probable ha sufrido la misma pérdida de energía. Para una partícula libre, en presencia de fricción con $N\xi = 2$, se hubiera encontrado exactamente la misma pérdida de energía como la observada en la figura 15. Esto no era esperado ya que en el caso de penetración bajo una barrera parecería que las ondas que pierden menos energía tendrían una mayor posibilidad de penetrar la barrera.

Se esperaba el máximo de las probabilidades transmitidas para un número de canal n más pequeño.

La figura 16 da la onda incidente y transmitida total en la región II como una función de N . Allí $N\xi = 2$ está fijo. Para N grandes la onda transmitida es independiente de N mientras la onda incidente en

la región II, que se necesitan para satisfacer las condiciones apropiadas de ensamble en $x = L$, decrece a medida que N aumenta. Esto está relacionando al hecho que el spread en energía decrece cuando N aumenta (ver también figura 15).

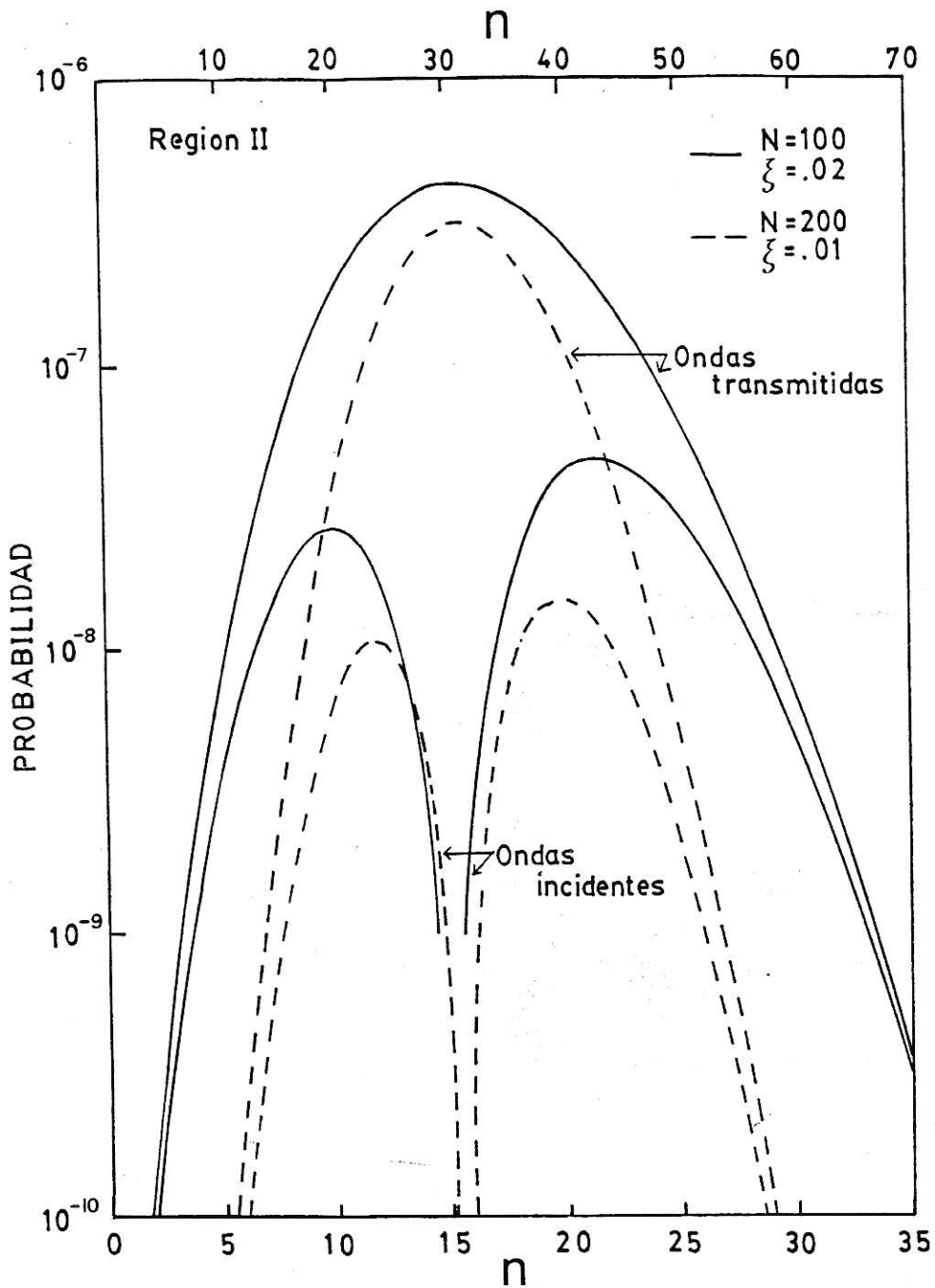


FIGURA 15: Probabilidad para las ondas en la región II en los diferentes canales.

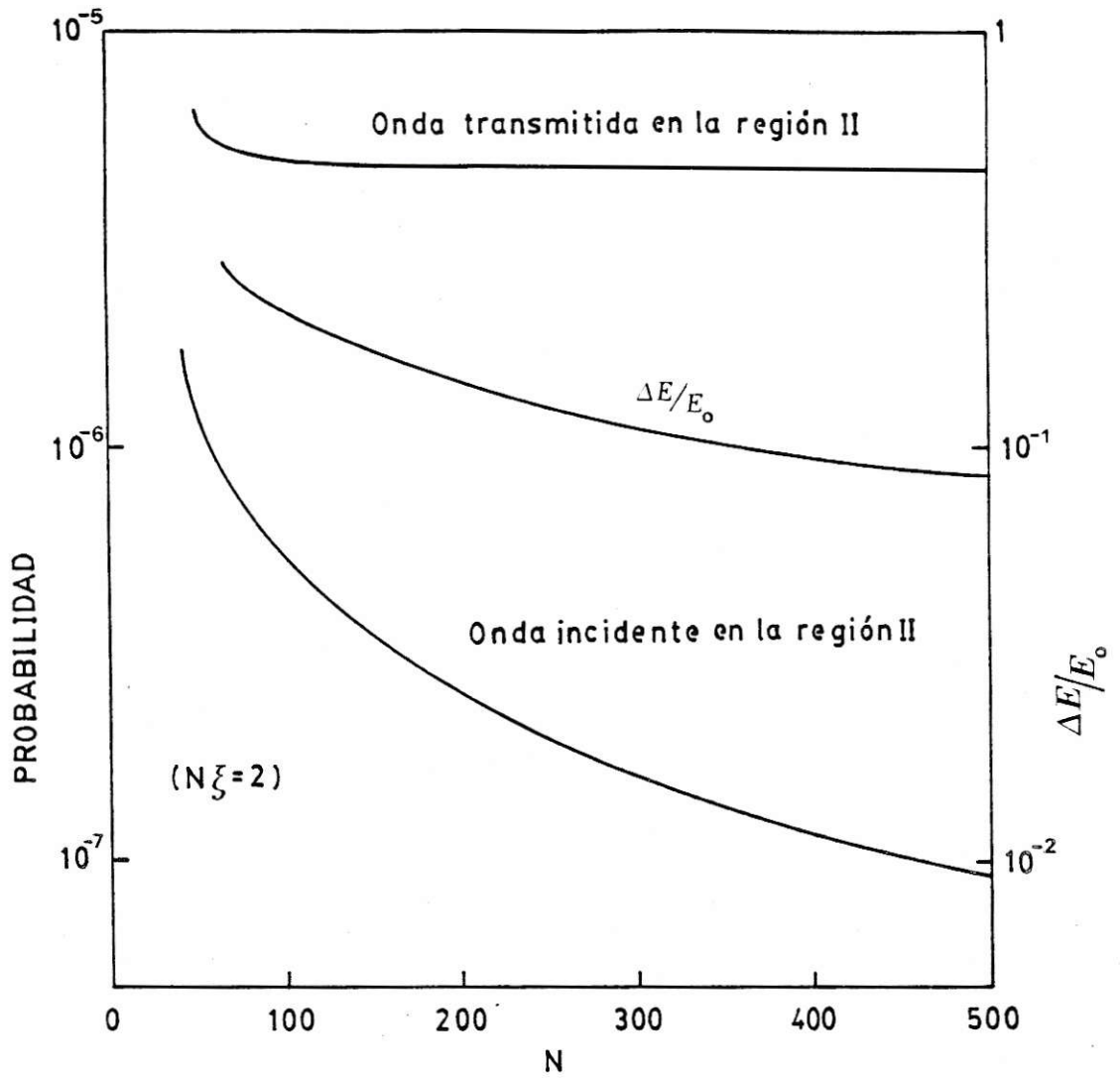


FIGURA 16: Ondas total Incidente y Transmitida en la Región II versus N (ver texto).

CONCLUSIONES

En esta tesis se estudiaron algunos aspectos de un novedoso modelo para simular fricción en mecánica cuántica.

Este método tiene como punto de partida una ecuación de Schrödinger lineal tiempo independiente. Siendo válido el principio de superposición, a partir de sus soluciones estacionarias se pueden construir paquetes de ondas y estudiar su evolución temporal. El método se presta para realizar en forma sencilla estudios numéricos de problemas de mecánica cuántica en presencia de fricción.

En el así llamado "límite continuo" se obtienen soluciones cuyo comportamiento es muy análogo al de una partícula clásica. En este límite fue posible estudiar los casos de fricción de Coulomb y Stokes. En el caso de roce de Stokes (es decir roce proporcional a la velocidad) se encontraron resultados, específicamente una "función de onda", que es solución de una ecuación tipo Kostin-Schrödinger.

Para el caso de penetración de una barrera de potencial se encontraron algunos resultados no esperados.

La principal deficiencia del método radica en que sólo es válido bajo las mismas condiciones en que lo es el método WKB (es decir, en el régimen semiclásico). Al estudiar el comportamiento de una partícula sometida a fricción, esta deficiencia impide incluir en el estudio el momento en que se "detiene" y, por lo tanto, restringe en forma importante los problemas a los que se puede aplicar.

Hay algunos aspectos de este método que aún deberían estudiarse. Entre ellos cabe mencionar los siguientes:

1. Un estudio numérico (o analítico si esto es posible) del comportamiento de las varianzas en el espacio de coordenadas y de momento para un paquete de ondas en presencia de roce. De esta manera se podría compararlo con los otros existentes.

2. Un estudio de qué ocurre a un paquete de ondas al ser casi detenido por algunos pocos "cortes oscilador armónico", es decir un estudio de un paquete de ondas ya a muy baja energía. Es claro que en tal estudio sería importante considerar también las ondas reflejadas.

3. Ver si es posible utilizar el método para estudiar el comportamiento de un oscilador armónico en presencia de roce. Ya que a muy altas energías el método WKB es aplicable a un oscilador armónico, esperamos que el modelo aquí desarrollado también lo sea.

4. Para el caso de penetración de una barrera fue fácil formular el problema con roce de Coulomb. Aunque no es completamente claro cómo generalizar esto para el caso de fricción de Stokes, se intuye cuál debería ser la manera de formular el problema. El caso de penetración de una barrera en presencia de roce requiere de un estudio más profundo para comprender cabalmente sus resultados y conocer con más precisión las condiciones bajo las cuales el presente método es válido.

REFERENCIAS

CALDIROLA, P., Nuovo Cim. 18 (1941) 393.

DEKKER, H., Physics Reports 80, N° 1 (1981) 1-112.

HASSE, R. W., Journal of Mathematical Physics, Vol. 16, N° 10, October 1975.

KANAI, E. Prog. Theor. Phys. 3, 440 (1948).

KAN, K., y GRIFFIN J., Phys. Lett. B 50, 241 (1974).

KOSTIN, M., J. Chem. Phys. 57, 3589 (1972).