

**Universidad de Sonora**  
**Departamento de Investigación en Física**



**“Estudio de la evolución temporal de un paquete de ondas  
sujeto a un potencial periódico unidimensional localizado”**

**TESIS**

**Que para obtener el grado de  
Maestro en Ciencias (Física)**

**Presenta**

**Adrián Navarro Badilla**

**JUNIO DE 2010**

**Hermosillo, Sonora.**

# Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



**"El saber de mis hijos  
hará mi grandeza"**



Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess

# INDICE GENERAL

<b>Introducción</b>	3
<b>1 Fundamentación</b>	
1.1 Fundamentos matemáticos básicos de la Mecánica Cuántica.	
1.1.1 Teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica.	7
1.1.2 La función de onda y el espacio de Hilbert.	10
1.1.3 Valores medios y propiedades de operadores.	12
1.2 Partícula Libre y Paquete de Onda gaussiano Unidimensional.	
1.2.1 Partícula libre.	15
1.2.2 Paquete de onda y su forma a un tiempo dado.	16
1.3 Evolución de un paquete de ondas.	
1.3.1 Evolución temporal de un paquete de ondas libre.	18
1.3.2. Paquete de onda gaussiano unidimensional: Esparcimiento del paquete de ondas.	20
<b>2 Solución numérica de la Ecuación de Schrödinger.</b>	
2.1 Introducción.	25
2.2 La Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y su discretización espacio-temporal.	26
2.3 El método de diferencias finitas para la parte temporal.	28
2.4 El método de R. Kosloff y D. Kosloff para la parte espacial.	30
2.5 Algoritmo numérico para la Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo.	31
<b>3 Evolución temporal de un paquete de ondas sujeto a la acción de un potencial no periódico.</b>	
3.1 Propagación de un paquete de onda en un potencial de partícula libre.	35
3.2 Propagación de un paquete de onda en un potencial de oscilador armónico.	48
<b>4 Evolución temporal de un paquete de ondas sujeto a la acción de un potencial periódico localizado.</b>	
4.1 Descripción del Potencial Sinusoide considerado.	61
4.2 Resultados obtenidos para la evolución temporal de un paquete de ondas Gaussiano sujeto a un potencial sinusoidal.	64
4.3 Evolución temporal de un paquete de ondas Gaussiano con una energía inicial de $E_0 = 0$ , contenido en un mínimo de un potencial sinusoide.	73
4.4 Evolución temporal de un paquete de ondas Gaussiano con una energía inicial diferente de cero, contenido en un mínimo de un potencial sinusoide.	81
<b>Resumen y Conclusiones</b>	89

<b>Bibliografía</b>	93
---------------------	----

**APENDICE A. Método de Fourier.**

A.1 Método de Fourier para el continuo.	95
A.2 Transformada de Fourier de una función discreta.	96
A.3 Teorema del muestreo y el "Aliasing".	97
A.4 La Transformada discreta de Fourier.	98
A.5 La Transformada rápida de Fourier.	100

# INTRODUCCIÓN

El estudio de la propagación de partículas en medios espacialmente periódicos tiene una amplia historia en la mecánica cuántica desde 1920. Como ejemplo, podemos citar el artículo de Philip M. Morse [1] donde plantea una solución general desarrollada para el movimiento de electrones en un campo de potencial del núcleo en una red cristalina. Concretamente, plantea el problema de determinar el comportamiento de electrones en cristales. Estos comportamientos tienen diversas aplicaciones en la difracción de electrones en superficies metálicas y en conductores metálicos; tal como lo muestran los experimentos desarrollados por Davidson y Germer en 1925 y que consistieron en la dispersión de electrones usando cristales de Ni; así como los desarrollados por George P. Thomson y reportados en 1928 [2], entre otras evidencias experimentales desarrolladas en los albores de la mecánica cuántica. Por otra parte, es importante mencionar que una contribución muy importante dentro de este rubro, es la aportación de M. V. Laue [3] en el estudio de partículas en redes cristalinas, en específico, en su artículo, el cual data desde 1931 y expone la difracción de un electrón, tratado como onda, el cual está sujeto a un potencial constituido de una capa simple de átomos.

Otro experimento es el desarrollado en 1988 por Martin, Oldaker, Miklich y Pritchard [4], en el cual reportan la primera observación de dispersión de Bragg de átomos de sodio por una onda de luz estacionaria. Lo anterior se debe a que, en electrones y neutrones, el medio periódico tiene usualmente la forma de una red cristalina, tal como se muestra en la figura A; mientras que para átomos el medio periódico tiene la forma de onda de luz estacionaria, lo cual es mostrado en la figura B.

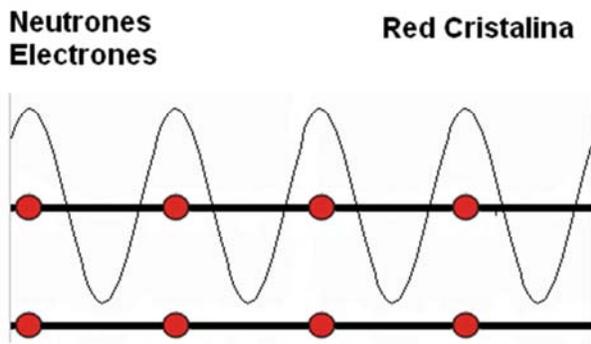


Figura A. Potencial para neutrones y electrones

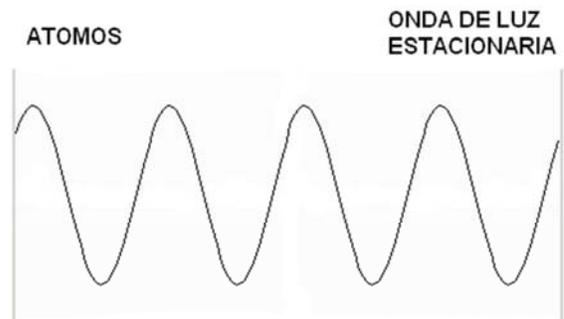


Figura B. Potencial para átomos

La importancia experimental de este resultado consistió en que representó un descubrimiento en la manipulación coherente de átomos, completando la tecnología necesaria para construir un interferómetro atómico.

En la actualidad, se le ha dado una importancia significativa a observar el comportamiento de partículas con cierta velocidad inicial, de tal forma que impactan sobre un potencial periódico específico de superred, tal como lo muestra el artículo de Herbert P. Simanjuntak y Pedro Pereyra [5] donde presentan un estudio formal en la evolución de un paquete de ondas, específicamente de tipo Gaussiano, el cual está centrado en un valor arbitrario de energía, donde se muestran fenómenos interesantes de dispersión, atrapamiento y efectos de tunelamiento. De igual forma se ha considerado a un paquete de ondas Gaussiano para su dispersión en un medio periódico finito, el cual está compuesto por el mismo número de pozos y barreras, de tal manera que sea posible medir en experimentos la probabilidad de encontrar la partícula en algún lugar de esta red determinada, la densidad de probabilidad local, entre otros valores. Esto último hecho por los autores Yu. G. Peisakhovich y A. A. Shtygashev [6].

Un potencial periódico poco común en la literatura de textos básicos, pero con muchas aplicaciones en la física moderna es lo que proponen los autores M. Horne, y , A. Zeilinger [7], los cuales presentan soluciones generales a la ecuación de Schrödinger en un medio con un potencial sinusoidal fuerte, además generalizan la teoría de la dinámica de la difracción.

Para llevar a cabo los análisis anteriores, se requiere resolver la ecuación de Schrödinger para cierta función de onda sujeta a un potencial determinado, dado que es posible describir los sistemas mecánicos cuánticos involucrados en el fenómeno físico que se estudie. Para ello se emplean diversos métodos analíticos, sin embargo, dado que no es sencillo obtener una solución exacta que cumpla con estos requerimientos, se opta por el camino de métodos numéricos.

Existen diversos métodos de este tipo en la actualidad para estudiar el movimiento de un paquete de onda Gaussiano en un potencial simétrico de doble pozo, en donde se demuestran resultados del propagador cuántico utilizando el método de Monte Carlo [8]. Otro método interesante es el expuesto por los autores W. van Dijk y F. M. Toyama [9], los cuales presentan una generalización y optimización del ya conocido método Crank-Nicolson para obtener soluciones numéricas de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. En su artículo presentan la oscilación de un paquete de ondas coherente, propagación de un paquete de ondas en un potencial de partícula libre y estudios para decaimiento de sistemas de largo tiempo.

Un método de suma importancia en este trabajo, es el expuesto por los autores R. Kosloff y D. Kosloff [10], donde plantean un nuevo propagador para utilizar la ecuación de Schrödinger en el estudio de un paquete de ondas dinámico en potenciales que incluyen un pozo profundo. Además realizan en detalle, en su aplicación numérica, cómo son calculadas las derivadas parciales que están involucradas en la ecuación de Schrödinger, todo esto, utilizando la transformada rápida de Fourier (FFT). Lo anterior se verá más adelante en el capítulo II de este trabajo, donde se presenta en detalle este algoritmo numérico, el cual también se tomó como guía de la referencia [11].

Por otra parte, podemos observar que en la mayoría de textos de física cuántica [12,13,14,15,16,17,18,19], existe el planteamiento de soluciones analíticas de la ecuación de Schrödinger para el análisis de alguna partícula que se encuentra sujeta a la acción de un potencial

determinado, ya sea periódico o no. Sin embargo a pesar de que los métodos de solución planteados, ofrecen resultados de precisión bastante razonable y considerable, dichos resultados no dejan de ser aproximados, es decir, no brindan soluciones exactas y además están sujetos a ciertas limitantes al momento de su tratamiento e interpretación. Un ejemplo de ello es el método de la teoría de perturbaciones, que bajo ciertas circunstancias, no representa un camino adecuado a seguir, este es el caso cuando el sistema en estudio no se puede describir por una pequeña perturbación impuesta a un sistema simple. Además, en la literatura de física cuántica, existe cierto grado de dificultad para estudiar algunos tipos de potenciales, dado que su forma característica puede complicar lo suficiente a la ecuación de Schrödinger para pensar en una solución analítica de la misma, por lo que los métodos numéricos de solución se vuelven indispensables, dado que representan una herramienta útil y efectiva al estudiar cualesquier potencial, sin restricción alguna.

Por lo anterior, y dada la importancia que tienen los potenciales periódicos en la historia de la física cuántica, se ha decidido llevar a cabo el análisis de la evolución temporal de un paquete de ondas, para nuestro caso de tipo Gaussiano, sujeto a un potencial periódico localizado, tal como el título de este estudio lo indica.

En este trabajo, inicialmente se plantean en el capítulo I, los fundamentos de la mecánica cuántica necesarios a considerar. Dado que las soluciones a las ecuaciones diferenciales, que describen los sistemas de mecánica cuántica, tienen una interpretación probabilística al considerar que el cuadrado del valor absoluto de la solución es una densidad de probabilidad. Para la mayoría de los sistemas, obtener soluciones exactas que cumplan con este requerimiento de interpretación no es fácil, por lo que se optan por las técnicas numéricas y de aproximación. Un camino para obtener estas soluciones de manera computacional, es construyendo paquetes de onda. Es por ello que también se ha incluido en este capítulo las definiciones y propiedades básicas de un paquete de ondas de tipo Gaussiano, que a fin de cuentas es el que se utilizara para el estudio de su propagación en los diversos potenciales presentados para su estudio más adelante.

En el segundo capítulo del presente trabajo se presenta el método numérico empleado para llevar a cabo la evolución temporal de un paquete de onda en algún potencial, ya sea este, periódico o no. En este primeramente definiendo la herramienta numérica básica como el método de diferencias finitas y el método de R. Kosloff y D. Kosloff y finalmente presentar el algoritmo numérico que conduce a la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo.

En el capítulo III, presentamos los resultados obtenidos al construir un paquete de onda para la ecuación de Schrödinger en una dimensión con potenciales independientes del tiempo, para problemas conocidos ampliamente en la literatura, tales como los de un paquete de ondas sujeto a los potenciales de partícula libre y de oscilador armónico. Dichos cálculos en los potenciales anteriores, nos permitieron ajustar el algoritmo y ver que efectivamente funcionaba de manera adecuada, proporcionando soluciones en concordancia con la solución obtenida de manera analítica, lo que nos permitió probar y ajustar la precisión del método numérico empleado en este trabajo.

En el Capítulo IV entraremos en contacto con la evolución de una partícula o bien un paquete de ondas Gaussiano en un potencial de tipo senoide, donde el potencial usado se tomó de la referencia [5], ajustado para el caso unidimensional. Para este potencial, se presentan resultados interesantes, tales como los valores esperados de la posición  $\langle x(t) \rangle$ , el momento lineal  $\langle p(t) \rangle$  y la energía total del sistema  $\langle E(t) \rangle$ . Además de lo anterior, se ofrece la presentación de resultados donde existen fenómenos de atrapamiento y tunelamiento de la partícula al impactar con una velocidad inicial determinada en el potencial senoide, tal como se abordan con mayor detalle en este trabajo de tesis.

Finalmente en el último capítulo se establecen las conclusiones de este trabajo, además se mencionan algunas de las situaciones que pueden ser estudiadas con estos resultados en un futuro inmediato.

# Capítulo I. FUNDAMENTACIÓN.

## 1.1 Fundamentos matemáticos básicos de mecánica cuántica.

### 1.1.1 Teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica.

Básicamente, el desarrollo de la teoría de la mecánica cuántica se inició con una idea expuesta por de Broglie, la cual es simple, pero fundamental: en la física clásica se considera que la radiación electromagnética es netamente un fenómeno de propagación ondulatorio. Por otra parte, las investigaciones de Einstein y Compton mostraron que en ciertas circunstancias dicha radiación electromagnética manifiesta una naturaleza corpuscular característica [12]. O bien, esta situación puede describirse indistintamente argumentando que la radiación electromagnética es una onda que al interactuar con la materia manifiesta un comportamiento corpuscular, o bien, que consta de partículas cuyo movimiento está determinado por las propiedades de propagación de ciertas ondas asociadas. De acuerdo a la segunda idea anterior, de Broglie examino la idea de que el movimiento de una partícula está gobernado por la propagación ondulatoria de ciertas ondas piloto (terminología propia de de Broglie) asociadas con dicha partícula.

A pesar de que la idea de de Broglie es correcta, no señala como se propagan las ondas piloto asociadas. Para el caso más simple, el cual constituye una partícula libre, es decir, aquella que no está sujeta a ninguna fuerza, es posible analizarlo desde este punto de vista. Sin embargo, para tratar el caso de una partícula que se mueve bajo la acción de una fuerza determinada, es necesario contar con una relación cuantitativa entre las ondas piloto y la partícula asociada. De otra manera, es necesario conocer exactamente como estas ondas “gobiernan” el movimiento de la partícula. La teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica es una herramienta bastante útil para ello.

Sin embargo, cabe aclarar que existe otro enfoque alternativo desarrollado por Heisenberg, manejando cantidades dinámicas tales como la posición  $x$ , el momento lineal  $p_x$  y la energía total  $E$ , entre otras, representada en su mecánica matricial. Estas teorías de la mecánica cuántica de Schrödinger y Heisenberg son idénticas en contenido, aunque en forma son distintas. Sin embargo, en este trabajo se abordara el punto de vista de Schrödinger, dado que se presta mejor para un tratamiento introductorio. Y debido a que es una herramienta útil para estudiar los fenómenos ondulatorios mencionados, vamos a mostrar las ideas básicas de las ecuaciones que le dieron origen.

### Argumentos de plausibilidad que conducen a la ecuación de Schrödinger.

Pese a que el postulado de de Broglie es consistente con la relatividad, Schrödinger se limitó a desarrollar una teoría no relativista. Por otra parte abandonó el término de onda piloto y llamó función de onda a una función  $\psi(x,t)$  la cual expresa una dependencia espacial y temporal.

Para encontrar la forma de la ecuación que nos describa la relación cuantitativa de la dualidad onda-partícula, y además, nos revele de qué forma la función de onda determina la probabilidad de observar la partícula en un lugar determinado, Schrödinger adoptó básicamente cuatro suposiciones razonables concernientes a las propiedades deseables de la ecuación de onda mecánico-cuántica:

1. Deberá coincidir con los postulados de de Broglie-Einstein, donde se señala que la longitud de onda  $\lambda$  y la frecuencia  $\nu$  de la onda asociadas con una partícula de impulso  $p$  y energía relativista total  $E$ , están dadas por:

$$\begin{aligned}\lambda &= h / p \\ \nu &= E / h\end{aligned}\tag{1.1}$$

donde  $h = 6.63 \times 10^{-27}$  erg-seg, corresponde a la llamada constante de Planck.

2. Deberá coincidir con una ecuación que relaciona la energía  $E$ , como una definición clásica de energía total de un sistema de masa  $m$  con su energía cinética y potencial respectivo  $V$ , de la siguiente forma:

$$E = p^2 / 2m + V\tag{1.2}$$

3. Deberá ser lineal en  $\psi(x,t)$ . Esto significa que, dadas  $\psi_1(x,t)$  y  $\psi_2(x,t)$  dos soluciones diferentes a la ecuación, una combinación lineal de estas funciones  $\psi(x,t) = \psi_1(x,t) + \psi_2(x,t)$  también es solución.

4. La energía potencial  $V$  generalmente es una función que depende de  $x$  y, posiblemente, de  $t$ . Sin embargo, un caso particular importante es  $V(x,t)=V_0$ , donde  $V_0$  es constante y por tanto,  $F = 0$ .

Ahora bien, si se utiliza las relaciones de de Broglie-Einstein de la suposición 1, e introduciendo las cantidades  $k = 2\pi / \lambda$  y  $\omega = 2\pi\nu$ , donde  $k$  es el número de onda y  $\omega$  la frecuencia angular respectivamente, es posible escribir la energía de la suposición 2 como:

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(x,t)\tag{1.3}$$

Todo esto, tomando en cuenta la denominada constante de Planck reducida,  $\hbar = h / 2\pi$ .

La suposición 3 indica que cada término de la ecuación sea lineal en  $\psi(x,t)$ , en consecuencia, cada termino debe contener a  $\psi(x,t)$  o una derivada de la misma, de la forma  $\partial\psi(x,t)/\partial x$ ,  $\partial^2\psi(x,t)/\partial x^2$ ,  $\partial\psi(x,t)/\partial t$  ó  $\partial^2\psi(x,t)/\partial t^2$ , por ejemplo.

Por otra parte, de acuerdo a la suposición 4 para encontrar la forma de la ecuación de Schrödinger, se hace uso de una función  $\psi(x,t)$  para una partícula libre, es decir para aquella que no esté sujeta a ninguna fuerza y con un potencial  $V_0$ . Para ello se considera la función de onda más simple para dicha partícula libre, la cual es de la forma:

$$\psi(x,t) = e^{i(kx - \omega t)} \quad (1.4)$$

Por lo que, calculando las derivadas parciales primeras y segundas con respecto al tiempo y a la posición de la expresión (1.4) y comparándola con la expresión (1.3), considerando  $V(x,t)=0$ , podemos observar que la segunda parcial de  $\psi(x,t)$  con respecto a la posición  $x$  involucra un factor de  $-k^2$  muy similar al primer término del lado derecho de la ecuación (1.3), mientras que la primera parcial de  $\psi(x,t)$  con respecto al tiempo muestra un factor de  $i\omega$  muy similar en el lado izquierdo de la igualdad de dicha expresión (1.3). Por lo que, uniendo estas ideas, la ecuación diferencial es la siguiente:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} \quad (1.5)$$

Para que la ecuación (1.5) concuerde con ecuación (1.3) es necesario agregar el potencial  $V(x,t)=V_0$ , de tal forma que la ecuación diferencial para un potencial de partícula libre, queda de la siguiente forma:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V_0 \psi(x,t) \quad (1.6)$$

Esta ecuación satisface las cuatro suposiciones iniciales. Dado que (1.6) es para el caso de un potencial  $V(x,t) = V_0$ , para el caso de un potencial que no sea constante  $V(x,t)$ , la ecuación diferencial que controla la propagación de la función de onda es:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\psi(x,t) \quad (1.7)$$

Finalmente, esta es la Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo.

### 1.1.2 La función de onda y el espacio de Hilbert.

En Mecánica Cuántica, el estado de un sistema físico está caracterizado por una función de onda  $\psi(\vec{r}, t)$  cuyo valor, es asociado a una partícula en movimiento a velocidades  $v$  mucho menores que  $c$ . Además, el cuadrado de la amplitud de la función de onda de la forma  $\psi(\vec{r}, t)$  representa la intensidad, la cual está relacionada directamente con la probabilidad de encontrar una partícula en el espacio de posiciones  $\vec{r}$  en un instante de tiempo  $t$ .

Dado que en general, la función de onda  $\psi(\vec{r}, t)$  puede representarse por medio de una cantidad compleja, sin embargo la probabilidad es siempre real, si queremos asociarla con una cantidad físicamente medible debemos considerar su módulo, a saber:

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi^*(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t) \quad (1.8)$$

donde  $\psi^*(\vec{r}, t)$  es el complejo conjugado de  $\psi(\vec{r}, t)$ .

Por otro lado, la probabilidad  $\rho(\vec{r}, t)$  de un evento siempre está comprendida entre cero (no ocurrencia) hasta uno (certeza absoluta de ocurrencia), lo que obliga a normalizar la función de onda. Esta condición de normalización de la función de onda es representada por:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r} = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\vec{r}, t) d\vec{r} = 1 \quad (1.9)$$

Lo cual significa que la probabilidad de encontrar la partícula en todo el espacio, debe ser igual a la unidad.

### Espacio de Hilbert.

Un espacio de Hilbert es un espacio vectorial completo finito o infinito en el campo básico de los números complejos. En este espacio, un producto escalar está definido de tal forma que se asigna un numero complejo a cada par de funciones de la forma  $\phi(\vec{r}, t)$  y  $\psi(\vec{r}, t)$  en un arreglo de funciones lineales. Las propiedades fundamentales del producto escalar son las siguientes [13]:

1. El producto escalar de  $\psi(\vec{r}, t)$  por  $\phi(\vec{r}, t)$  es el complejo conjugado del producto escalar de  $\phi(\vec{r})$  por  $\psi(\vec{r})$ :

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int \psi^*(\vec{r}, t) \phi(\vec{r}, t) d\vec{r} = \left( \int \phi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) d\vec{r} \right)^* = (\langle \phi | \psi \rangle)^* \quad (1.10)$$

2. Sea  $\psi(\vec{r}, t) = \lambda_1 \psi_1(\vec{r}, t) + \lambda_2 \psi_2(\vec{r}, t)$ , donde la función  $\psi(\vec{r}, t)$  está representada por una combinación lineal de la suma de dos funciones  $\psi_1(\vec{r}, t)$  y  $\psi_2(\vec{r}, t)$ , las cuales son dos funciones

cuadrado integrables y además,  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$  son dos constantes complejas arbitrarias, el producto escalar de  $\psi(\vec{r}, t)$  por  $\phi(\vec{r}, t)$  es lineal y está definido de la siguiente forma:

$$\langle \phi | \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \phi | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \phi | \psi_2 \rangle = \lambda_1 \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\vec{r}, t) \psi_1^*(\vec{r}, t) d\vec{r} + \lambda_2 \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\vec{r}, t) \psi_2^*(\vec{r}, t) d\vec{r} \quad (1.11)$$

3. La norma de una función  $\psi(\vec{r}, t)$  es el producto escalar de tal función por sí misma, la cual tiene como resultado un número real no negativo:

$$\langle \psi | \psi \rangle \geq 0 \quad (1.12)$$

Un caso particular de esta última propiedad es la condición de si  $\langle \psi | \psi \rangle = 0$ , entonces  $\psi(dr) = 0$ .

Por lo que el espacio de Hilbert satisface las propiedades de un espacio lineal de dimensión finita con producto escalar en él.

Además, otra propiedades importantes del espacio de Hilbert, es la de ser un espacio separable y completo. Al ser separable, significa que este espacio admite una base ortonormal numerable de sus elementos [13], es decir basada en un número finito de elementos de dicho espacio. Y por otra parte, completo en este contexto significa que cualquier sucesión de Cauchy de elementos del espacio converge a un elemento en el espacio, en el sentido que la norma de las diferencias tiende a cero.

Por otra parte, una función de onda  $\psi(\vec{r}, t)$  en este espacio de Hilbert puede ser aproximada por una expansión en serie [20]:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_k a_k \psi_k(\vec{r}) \quad (1.13)$$

donde los valores de  $a_k$  son la expansión de coeficientes de una función de onda arbitraria  $\psi(\vec{r})$  en términos de un arreglo completo de funciones  $\psi_k(\vec{r})$ .

Multiplicando la expresión (1.13) en ambos lados por su complejo conjugado, integrando sobre todo el espacio y utilizando la condición de ortonormalidad:

$$\langle \psi_k(\vec{r}) | \psi_k(\vec{r}) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k^*(\vec{r}) \psi_k(\vec{r}) d\vec{r} = \delta_{kk}, \quad (1.14)$$

se obtiene:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^*(\vec{r}) \psi_k(\vec{r}) d\vec{r} = \int_V |\psi|^2 dV = \sum_k |a_k|^2 \quad (1.15)$$

lo que nos permite obtener la relación de completéz.

Para determinar el valor de los coeficientes  $a_k$  de la expansión (1.13), multiplicamos esta ecuación por  $\psi_k^*$  e integramos sobre todo el espacio:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k^*(\vec{r})\psi(\vec{r})d\vec{r} = \sum_{k'} a_{k'} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k^*(\vec{r})\psi_{k'}(\vec{r})d\vec{r} = \sum_{k'} a_{k'}\delta_{kk'} = a_k \quad (1.16)$$

donde:

$$a_k = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k^*(\vec{r})\psi(\vec{r})d\vec{r} \quad (1.17)$$

El coeficiente  $a_k$  puede interpretarse como el resultado del producto interior entre la función de onda  $\psi_k^*(\vec{r})$  y otra función de onda  $\psi(\vec{r})$ ; o en términos de una representación vectorial,  $a_k$  puede interpretarse como la proyección de  $\psi(\vec{r})$  a lo largo de  $\psi_k^*(\vec{r})$ .

### 1.1.3. Valores medios en Mecánica Cuántica y propiedades de los operadores.

1. El valor medio de las coordenadas de posición. Consideraremos una partícula y su función de onda. Por lo que la probabilidad de encontrar a la partícula en  $\psi(x,t)$  y su probabilidad de encontrarla en un espacio  $x + \Delta x$  de acuerdo a (1.8). Por consiguiente el valor medio de la posición es de la forma:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x\rho(x,t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)x\psi(x,t)dx \quad (1.18)$$

Por lo que, en términos generales, es fácil ver que el valor esperado de cualquier función  $f(x,t)$  que depende de  $x$  y  $t$  está dada por:

$$\langle f(x,t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)f(x,t)\psi(x,t)dx \quad (1.19)$$

De aquí que, las mediciones que se realizan para obtener el valor medio se hacen en el mismo tiempo  $t$ .

2. El valor medio del momento lineal. Por analogía con las ecuaciones (1.18) y (1.19), podemos representarlo como:

$$\langle \vec{p} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)p\psi(x,t)dx \quad (1.20)$$

El problema de la ecuación anterior (1.20) es el hecho de que para calcular la integral es necesario precisar  $p$  como una función de  $x$  y  $t$ . En el caso cuántico no es posible dado el

principio de incertidumbre de Heisenberg [15]. Entonces es conveniente encontrar una forma de expresar el integrando de (1.20) en términos de  $x$  y  $t$ . La forma que se busca, es posible inferirla considerando el caso de una partícula libre con una función de onda:

$$\psi_f = e^{i(kx - \omega t)} \quad (1.21)$$

Si derivamos parcialmente respecto a  $x$  la función (1.21) y recordando que podemos observar que existe una relación  $k = p/\hbar$  entre la variable dinámica  $p$  y el operador diferencial  $-i\hbar\partial/\partial x$ :

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (1.22)$$

Por lo que aplicando (1.22) y (1.20) obtenemos la expresión del valor esperado del impulso:

$$\langle \hat{p} \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t) \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} dx \quad (1.23)$$

De manera análoga, es posible calcular el valor medio de la energía como se muestra a continuación.

3. El valor medio de la energía. De acuerdo al punto anterior, si derivamos (1.21) con respecto a  $t$  y se toma en cuenta  $\omega = E/\hbar$ , se encuentra una relación semejante que existe entre la energía  $E$  y un operador diferencial:

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (1.24)$$

Por lo que, sustituyendo (1.24) en (1.19) se obtiene que el valor esperado de la energía es de la forma:

$$\langle E \rangle = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t) \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} dx \quad (1.25)$$

Haciendo una analogía con los operadores diferenciales de la ecuación de Schrödinger (1.7) y (1.25) puede ser reescrita como:

$$\langle E \rangle = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t) \right) \psi(x,t) dx \quad (1.26)$$

En general, podemos calcular el valor esperado de cualquier variable dinámica como:

$$\langle f(x, p, t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) f(x, -i\hbar \partial/\partial x, t) \psi(x, t) dx \quad (1.27)$$

donde el operador  $\hat{f}(x, p, t)$  se obtiene reemplazando  $p$  por el operador  $-i\hbar \partial/\partial x$  en la función  $f(x, p, t)$ , la cual específica a la variable dinámica  $f$ .

Los resultados anteriores muestran que la función de onda, además de determinar la densidad de probabilidad, permite también calcular el valor esperado de cualquier variable dinámica.

### Propiedades de operadores.

Hasta este punto, se ha visto que las variables dinámicas se representan por medio de operadores. Por lo que es conveniente citar algunas propiedades de los operadores, que se presentaran a continuación sin pretensión de rigor matemático.

Al momento de calcular la norma de una función de onda y sus valores esperados de variables dinámicas, si se utilizan los valores medios de posición y momento de una partícula, es posible obtener el promedio del valor de una cantidad observable  $F$ , la cual puede ser representada por una función operador  $\hat{F}(x, \hat{p})$  en un estado  $\psi$ :

$$\langle \hat{F} \rangle = \bar{F} = \int_V \psi^* \hat{F} \psi dV \quad (1.28)$$

donde  $\hat{F}$  representa al operador relacionado con la cantidad  $F$ .

Sea  $U$  y  $W$  dos arreglos de funciones. Definimos un mapeo continuo  $\hat{L}: U \rightarrow W$  con  $\hat{L}(u) = w$  dónde  $u \in U; w \in W$  y llamamos  $\hat{L}$  un operador. El operador  $\hat{L}$  relaciona una función  $u \in U$  a una nueva función  $w \in W$ . Simbólicamente escribimos esta operación como un producto del operador  $\hat{L}$  con la función  $u$ :

$$\hat{L}(u) = \hat{L}u = w \quad (1.29)$$

Un operador con la propiedad:

$$\hat{L}(\alpha_1 u_1 + \alpha_2 u_2) = \alpha_1 w_1 + \alpha_2 w_2 \quad (1.30)$$

donde  $\alpha_1, \alpha_2$  son constantes arbitrarias y  $u_1, u_2$  son funciones arbitrarias, por lo que  $\hat{L}$  es llamado un operador lineal.

Como ejemplo de operadores lineales podemos mencionar al operador posición  $\hat{x} = x$  y el operador de momento lineal  $\hat{p}_x = i\hbar \partial/\partial x$ .

Por otro lado, un operador lineal es autoadjunto o Hermitiano si:

$$\int_V (\hat{L}\psi_1)^* \psi_2 dV = \int_V \psi_1^* \hat{L}\psi_2 dV \quad (1.31)$$

donde  $\psi_1$  y  $\psi_2$  son funciones arbitrarias cuadrado integrables.

En mecánica cuántica se requiere que todos los operadores sean autoadjuntos y lineales. Para describir cantidades medibles con operadores, los valores medios deben ser reales. Esta propiedad se garantiza con los operadores Hermitianos, es decir, se debe de cumplir que:

$$\bar{L} = \int_V \psi^* \hat{L} \psi dV = \int_V (\hat{L}\psi)^* \psi dV = \left[ \int_V \psi^* \hat{L}\psi dV \right]^* = \bar{L}^* \quad (1.32)$$

Y además el valor medio es real.

## 1.2 Partícula libre y el paquete de ondas unidimensional.

### 1.2.1 Partícula libre.

Consideremos una partícula cuya energía potencial es cero en cada punto en el espacio; por lo que la partícula no está sujeta a fuerza alguna.

Cuando  $V(\vec{r}, t) = 0$ , la ecuación de Schrödinger se escribe de la siguiente forma:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) \quad (1.33)$$

Esta ecuación diferencial satisface soluciones de la forma:

$$\psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} \quad (1.34)$$

donde A es una constante.

Dado que  $k$  y  $\omega$  satisfacen la relación  $\omega = \hbar k^2/2m$ , las relaciones de de Broglie  $E = \hbar\omega$  y  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ , la energía puede expresarse en términos del momento lineal  $\vec{p}$  para una partícula libre de la siguiente forma:

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (1.35)$$

Por otra parte, el principio de superposición señala que cada combinación lineal de ondas planas satisface la relación  $\omega = \hbar \bar{k}^2 / 2m$  ya señalada anteriormente y además es solución de la ecuación (1.33), la cual expresada en términos de una función de onda como una superposición de ondas planas como un paquete de ondas, que si viaja de manera unidimensional paralelo al eje x:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{i[\bar{k} \cdot x - \omega(k)t]} dk \quad (1.36)$$

Si escogemos este instante como el origen temporal t=0, la función de onda (1.36) toma la siguiente forma:

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{ikx} dk \quad (1.37)$$

Podemos observar que  $g(k)$  es la transformada de Fourier de  $\psi(x,0)$  dada por:

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,0) e^{-ikx} dx \quad (1.38)$$

Finalmente, cualquiera que sea el potencial,  $\psi(x,0)$  puede ser escrito de esta forma.

### 1.2.2. Paquete de Onda y su forma en un tiempo dado.

La forma del paquete de onda está dada por la dependencia en x de  $\psi(x,0)$ , definida anteriormente por la expresión (1.37).

Si tenemos un paquete de onda con su valor central situado en  $k = k_0$  y de anchura  $\Delta k$ , podemos entender el comportamiento de dicho paquete de onda  $\psi(x,0)$  de la siguiente manera: Aproximamos a la función gaussiana como la suma de tres ondas planas, cuyos vectores de onda son  $k_0$ ,  $k_0 - \frac{\Delta k}{2}$  y  $k_0 + \frac{\Delta k}{2}$ , y sus amplitudes son proporcionales, respectivamente a 1,  $\frac{1}{2}$  y  $\frac{1}{2}$ . De aquí que:

$$\psi(x,0) = \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}} \left\{ e^{i[k_0 x]} + \frac{1}{2} e^{i\left(k_0 - \frac{\Delta k}{2}\right)x} + \frac{1}{2} e^{i\left(k_0 + \frac{\Delta k}{2}\right)x} \right\}$$

o

$$\psi(x,0) = \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0 x} \left\{ 1 + \text{Cos}\left(\frac{\Delta k}{2} x\right) \right\} \quad (1.39)$$

Definiendo  $\alpha(k)$  como el argumento de la función  $g(k)$  se tiene:

$$g(k) = |g(k)| e^{i\alpha(k)} \quad (1.40)$$

A continuación, asumiremos que  $\alpha(k)$  varía suavemente dentro del intervalo  $\left[ k_0 - \frac{\Delta k}{2}, k_0 + \frac{\Delta k}{2} \right]$  donde  $|g(k)|$  es apreciable; entonces, cuando  $\Delta k$  es suficientemente pequeño, se puede expandir  $\alpha(k)$  en la vecindad de  $k = k_0$  como:

$$\alpha(k) \cong \alpha(k_0) + (k - k_0) \left[ d\alpha/dk \right]_{k=k_0} \quad (1.41)$$

Insertando este resultado en (1.37) tenemos que:

$$\psi(x,0) = \frac{e^{i[k_0 x + \alpha(k_0)]}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} |g(k)| e^{i(k-k_0)(x-x_0)} dk \quad (1.42)$$

Con  $x_0 = \left[ d\alpha/dk \right]_{k=k_0}$  y representando la posición del valor central del paquete de ondas al tiempo inicial,  $X_M(0)$  tal que:

$$X_M(0) = x_0 = \left[ d\alpha/dk \right]_{k=k_0} \quad (1.43)$$

Finalmente, un paquete de ondas tal como la expresión (1.36) representa el estado de una partícula cuya probabilidad de presencia, al tiempo  $t = 0$ , es prácticamente cero fuera de un intervalo de aproximadamente una anchura  $\Delta x$  centrado en el valor  $x_0$ .

### 1.3 Evolución de un paquete de ondas.

#### 1.3.1 Evolución temporal de un paquete de ondas libre.

Hasta este momento, hemos conceptualizado en términos generales la forma de un paquete de ondas en un instante de tiempo dado. En este apartado estudiaremos su evolución. Para ello, utilizamos el caso de una partícula libre cuyo estado es descrito por el paquete de onda unidimensional [21]:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{ik \left[ x - \frac{\omega(k)}{k} t \right]} dk \quad (1.44)$$

La exponencial representa una onda plana que se propaga a lo largo del eje  $x$ . La razón entre  $\omega(k)$  y  $k$  es la velocidad de fase dada por:

$$V_{\phi}(k) = \frac{\omega(k)}{k} \quad (1.45)$$

O bien, en términos de  $\omega = \hbar \bar{k}^2 / 2m$ :

$$V_{\phi}(k) = \frac{\hbar k}{2m} \quad (1.46)$$

Sin embargo, más adelante veremos que la velocidad de un máximo  $X_M$  del paquete de onda no es el promedio de la velocidad de fase  $\frac{\omega_0}{k_0} = \frac{\hbar k}{2m}$ , contrario a lo que se puede esperar.

Para probar lo anterior, consideremos tres ondas para un tiempo arbitrario  $t$ , donde  $\psi(x, t)$  está dado por:

$$\psi(x, t) = \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}} \left\{ e^{i[k_0 x - \omega_0 t]} + \frac{1}{2} e^{i \left[ \left( k_0 - \frac{\Delta k}{2} \right) x - \left( \omega_0 - \frac{\Delta \omega_0}{2} \right) t \right]} + \frac{1}{2} e^{i \left[ \left( k_0 + \frac{\Delta k}{2} \right) x - \left( \omega_0 + \frac{\Delta \omega_0}{2} \right) t \right]} \right\}$$

Haciendo un poco de algebra y utilizando la expresión de Cauchy:

$$\psi(x, t) = \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}} e^{i[k_0 x - \omega_0 t]} \left\{ 1 + \text{Cos} \left( \frac{\Delta k}{2} x - \frac{\Delta \omega_0}{2} t \right) \right\}$$

Observamos que el máximo de  $|\psi(x,t)|$ , el cual se ubica en  $x = 0$  al tiempo  $t = 0$ , está definido como el punto:

$$X_M(t) = \frac{\Delta\omega}{\Delta k} t \quad (1.47)$$

Y no el punto  $x = \frac{\omega_0}{k_0}$ .

Por otra parte, el cambio del centro del paquete de onda (1.36) puede obtenerse aplicando el método de fase estacionario. Para ello, el paquete de ondas libre que va de  $\psi(0,t)$  a  $\psi(x,t)$ , es necesario cambiar  $g(k)$  a  $g(k) e^{-i\omega(k)t}$ . De aquí que, reemplazamos el argumento  $\alpha(k)$  de  $g(k)$  por:

$$\alpha(k) - \omega(k)t$$

Siendo la posición  $X_M(0) = x_0 = \left[ \frac{d\alpha}{dk} \right]_{k=k_0}$  tenemos que:

$$X_M(t) = \left[ \frac{d\omega}{dk} \right]_{k=k} t - \left[ \frac{d\alpha}{dk} \right]_{k=k_0}$$

Aplicando el resultado de la expresión (1.47), podemos observar que la máxima velocidad del paquete de onda es:

$$V_G(k_0) = \left[ \frac{d\omega}{dk} \right]_{k=k} \quad (1.48)$$

donde  $V_G$  es llamada la velocidad de grupo del paquete de onda. Con la relación de dispersión  $\omega = \hbar\bar{k}/2m$ , obtenemos que:

$$V_G(k_0) = \frac{\hbar k_0}{m} = 2V_\phi(k_0) \quad (1.49)$$

### 1.3.2. Paquete de onda gaussiano unidimensional: esparcimiento del paquete de onda.

En este apartado, se pretende estudiar en particular, a un paquete de onda libre y unidimensional. Se requiere verificar ciertas propiedades para observar la variación en el tiempo de la anchura de este paquete de onda y revelar el fenómeno de dispersión en el tiempo.

#### Definición de un paquete de onda gaussiano.

Consideremos, en un modelo unidimensional, una partícula libre  $\{V(x) = 0\}$  cuya función de onda para  $t = 0$ , es de la siguiente forma:

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{ikx} dk \quad (1.50)$$

donde este paquete se obtiene por la superposición de ondas planas  $e^{ikx}$  con los coeficientes:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} g(k) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2} \quad (1.51)$$

La expresión anterior corresponde a una función gaussiana centrada en  $k = k_0$ . Además, está multiplicado por un coeficiente numérico que normaliza a la función de onda, por lo que la expresión es llamada gaussiana.

Para calcular  $\psi(x,0)$ , agrupamos, los exponentes de la expresión (1.51) con los términos de la expresión (1.47), donde establecemos la dependencia de los términos dependientes de  $k$  en términos de un cuadrado perfecto, escritos de la siguiente forma:

$$-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2 + ikx = -\frac{a^2}{4} \left[ k - k_0 - \frac{2ix}{a^2} \right]^2 + ik_0x - \frac{x^2}{a^2}$$

Por lo que la expresión (1.51) queda reescrita de la siguiente forma:

$$\psi(x,0) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} e^{ik_0x - \frac{x^2}{a^2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{a^2}{4} \left[ k - k_0 - \frac{2ix}{a^2} \right]^2} dk \quad (1.52)$$

Proponemos el siguiente cambio de variable:

$$u = \frac{a}{2} \left[ k - k_0 - \frac{2ix}{a^2} \right]$$

De tal forma que:

$$\psi(x,0) = \left(\frac{2}{\pi^3 a^2}\right)^{1/4} e^{ik_0 x - \frac{x^2}{a^2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du$$

Utilizando la integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du = \sqrt{\pi}$$

Tenemos que:

$$\psi(x,0) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{ik_0 x} e^{-x^2/a^2} \quad (1.53)$$

Y aquí, como se podía esperar, la transformada de Fourier de una función gaussiana es también una función Gaussiana.

La densidad de probabilidad de la partícula al tiempo  $t = 0$ :

$$|\psi(x,0)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} e^{-2x^2/a^2} \quad (1.54)$$

La curva que representa la expresión anterior es la familiar curva de la campana. El centro del paquete de onda está situado en el punto  $x = 0$ .

### Calculo de $\Delta x$ y $\Delta p$ ; relación de incertidumbre.

Cuando se estudia la función gaussiana  $f(x) = e^{-x^2/b^2}$ , se acostumbra definir su anchura  $\Delta x$ :

$$\Delta x = \frac{b}{\sqrt{2}} \quad (1.55)$$

Cuando  $x$  varía de 0 a  $\pm \Delta x$ ,  $f(x)$  es reducida por un factor de  $1/\sqrt{e}$ . Esta definición que es arbitraria, nos permite coincidir con la desviación cuadrática media de la variable  $x$ . Con esta convención, podemos calcular la anchura  $\Delta x$  del paquete de onda de la expresión (1.51):

$$\Delta x = \frac{a}{2} \quad (1.56)$$

De igual manera, para calcular la anchura de  $\Delta k$ , dado que  $|g(k,0)|^2$  es también una función Gaussiana, la cual:

$$\Delta k = \frac{1}{a} \quad (1.57)$$

O bien:

$$\Delta p = \frac{\hbar}{a} \quad (1.58)$$

Del producto de las expresiones (1.56) y (1.58):

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2} \quad (1.59)$$

El cual es un resultado enteramente compatible con la relación de incertidumbre de Heisenberg.

### **Evolución del paquete de ondas.**

Para calcular la evolución temporal de la función de onda  $\psi(x,t)$  para todo tiempo  $t$ , utilizamos la siguiente expresión:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \quad (1.60)$$

Que corresponde a la función de onda de una particular libre.

Para nuestro caso, previamente estudiado, tenemos que  $\psi(x,t)$  está dado por:

$$\psi(x,t) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2} e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \quad (1.61)$$

donde  $\omega(k) = \hbar k^2 / 2m$ , corresponde a la llamada relación de dispersión de la particular libre; de donde podemos observar que el paquete de onda permanece todavía gaussiano.

Al igual que en la sección anterior agrupamos los términos del argumento de la exponencial para crear un cuadrado perfecto y utilizamos el resultado de la integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du = \sqrt{\pi}$$

Y así, obtenemos la siguiente expresión para  $\psi(x, t)$ :

$$\psi(x, t) = \left(\frac{2a^2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{e^{i\varphi}}{\left(a^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}\right)^{1/4}} e^{ik_0 x} e^{\left\{ \frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{a^2 - \frac{2i\hbar}{m} t} \right\}} \quad (1.62)$$

donde  $\varphi$ , que es real e independiente de  $x$ , está dada por:

$$\varphi = -\theta - \frac{\hbar k_0^2}{2m} t ; \quad \tan 2\theta = \frac{2\hbar}{m a^2} t \quad (1.63)$$

Con lo anterior, la densidad de probabilidad  $|\psi(x, t)|^2$  de la partícula al tiempo  $t$  estará dada por la expresión:

$$|\psi(x, t)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}} e^{\left\{ \frac{2a^2 \left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{a^4 + \frac{4\hbar}{m^2} t^2} \right\}} \quad (1.64)$$

En esta expresión podemos observar que la densidad de probabilidad para el paquete de ondas es una función gaussiana centrada en:

$$x = v_0 t$$

donde  $v_0$  es la velocidad de grupo del paquete de onda definida como:

$$v_0 = \frac{\hbar k_0}{m} \quad (1.65)$$

Una vez que se tiene la expresión para  $\psi(x,t)$  es posible calcular la norma del paquete de onda, a saber:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx \quad (1.66)$$

Y de aquí, se puede corroborar que está normalizada, es decir, el resultado de (1.66) es igual a la unidad. Por lo que también se puede observar que la norma del paquete de onda no es dependiente del tiempo.

## Capítulo 2. SOLUCIÓN NUMÉRICA DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER.

### 2.1 Introducción.

El estudio numérico de la ecuación de Schrödinger, por medio del método de diferencias finitas, es una herramienta valiosa para simular la dinámica de un sistema mecánico cuántico. Es particularmente usual para el estudio de fenómenos transitorios cuando existe una dependencia temporal o efectos no lineales.

Además, las simulaciones numéricas ayudan de manera significativa a visualizar la mecánica cuántica y permiten un estudio detallado de fenómenos cuánticos de interés, el cual sería muy difícil de aproximar de otra manera. Ejemplos de este tipo serían: el efecto de doble joroba, la pérdida de coherencia en potenciales no cuadráticos y comportamiento caótico en tunelamiento no lineal. Sin embargo, en alguna simulación numérica se tiene que especificar las condiciones de frontera, las cuales dependen en particular de la clase de sistema a estudiar.

El estudio de sistemas cuánticos cerrados está definido por condiciones locales simples. Con “local” nos referimos a que solamente se involucra un punto de la malla. Para sistemas cuánticos abiertos, las correctas condiciones de frontera pueden ser fácilmente encontradas en el estudio de la dispersión de un paquete de ondas. En este caso la función de onda es apreciablemente diferente de cero sólo sobre una limitada región del espacio y la situación es equivalente a un sistema cerrado.

Sin embargo, no siempre es posible utilizar paquetes de ondas. Dado que, no son siempre adecuados sustitutos para ondas planas. Por otro lado, una onda plana con vector de onda  $k$  puede ser aproximada por un paquete de onda con un vector de onda promedio  $k$  si su anchura  $\Delta$  es mucho más grande que la longitud de onda  $\lambda=2\pi/k$ , esto es, que la condición  $\Delta \gg \lambda=2\pi/k$  se cumpla. Por otro lado, las dimensiones de la malla numérica son limitadas por la velocidad y la capacidad de memoria de la computadora. Si el valor de  $k$  es demasiado pequeño, las dimensiones numéricas de la malla, crecerán en un factor  $1/k$ , las cuales son prohibidas.

En este trabajo, se estudia un sistema modelo, descrito por la Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo unidimensional, donde el potencial externo  $V(x,t)$  es una función general de la variable espacial  $x$  y de la variable temporal  $t$ .

Por conveniencia se introducirá unidades arbitrarias de energía, al igual que unidades espaciales y temporales, como se verá más adelante en el desarrollo de este trabajo. Y así, Con lo anterior, en el momento en que se reescriba la expresión para el Hamiltoniano de un sistema dado, la ecuación de Schrödinger nos proporcionará toda la información dinámica de dicho sistema.

La idea central de reescribir la Ecuación de Schrödinger de una manera simple es llevar a cabo la discretización de esta en el espacio y el tiempo en una malla uniforme, con la finalidad de emplear el método de Fourier y su transformada rápida (FFT) para calcular el Laplaciano que

aparece en la ecuación de Schrödinger. Por otra parte, para llegar a la solución de la derivada parcial temporal se realizará su cálculo con el Método de Diferencias Finitas a segundo orden.

Con lo anterior, será posible analizar la evolución temporal de un paquete de ondas de tipo gaussiano en interacción con diferentes potenciales periódicos, donde su solución analítica, en algunos casos, es descrita en libros de textos referentes al tópico de mecánica cuántica. Finalmente se analizará un potencial periódico de tipo sinusoidal en el que no se ha probado sus soluciones analíticas en este tipo de trabajo.

## 2.2 La Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y su discretización espacio-temporal.

En mecánica cuántica el estado del sistema es representado por la función de onda  $\psi$ , y la evolución temporal es gobernada por la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \quad (2.1)$$

con

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V} \quad (2.2)$$

donde  $\hat{H}$  es el operador Hamiltoniano del sistema y el estado inicial es  $\psi$ .

Tomando en consideración unidades atómicas, en donde  $\hbar = 1$  y la masa  $m$  está dada en unidades de la masa del electrón, la expresión (2.1) puede ser reescrita en la siguiente forma:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \quad (2.3)$$

que corresponde a la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo la nos proporciona toda la información dinámica del Sistema descrito por el Hamiltoniano  $H$ .

Esta Ecuación se puede resolver para unos pocos casos en los que la ecuación diferencial resultante lleva a soluciones cerradas; sin embargo, en la mayoría de los casos en que el potencial no tiene una forma simple, esta suele resolverse usando métodos numéricos, por lo que la idea central detrás de la aproximación numérica es discretizar el espacio de Hilbert del problema, y construir un nuevo espacio de Hilbert en el cual los operadores Hermitianos sean mapeados en operadores Hermitianos.

Sea la expresión (2.3) para el caso unidimensional, explícitamente en la dirección del eje  $x$ ; tenemos:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V \psi \quad (2.4)$$

La función de onda discretizada en el espacio y tiempo se realiza considerando una malla uniforme:

$$\psi^{(n)}(x_m) \quad (2.5)$$

donde  $n$  denota la iteración temporal y  $m$  la iteración espacial. Además, la malla espacial satisface que:

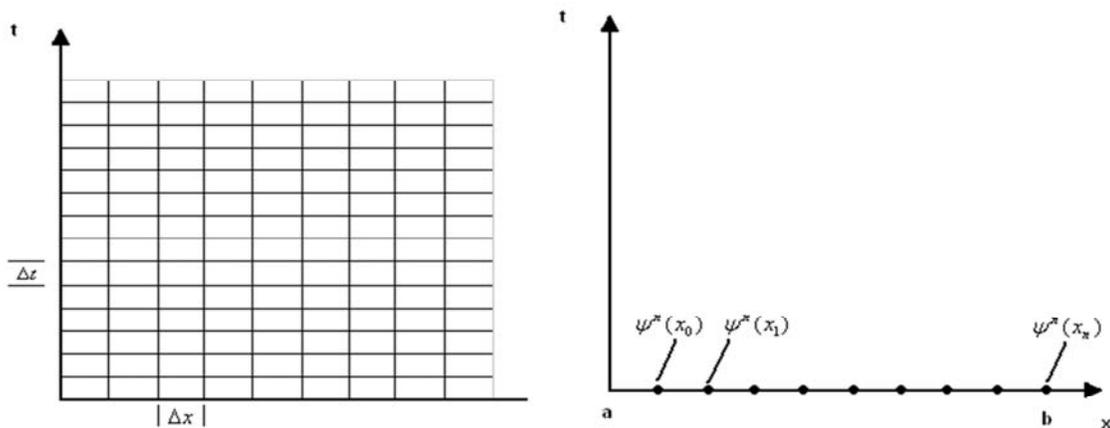
$$x_m = m\Delta x ; \quad m = 0, 1, 2, 3, \dots, M \quad (2.6)$$

donde  $M$  representa el tamaño de la malla en la coordenada espacial, correspondiente al eje  $x$  del plano cartesiano.

Mientras que para la parte temporal se tiene que:

$$t = n\Delta t ; \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots, N \quad (2.7)$$

donde, en este caso,  $N$  es el tamaño de la malla para la parte temporal, correspondiente al eje  $y$  del plano cartesiano. Todo esto, representado gráficamente:



**Figura 2.1** Tamaño de la malla espacial y temporal, y sus funciones de onda en el espacio unidimensional  $x$ , dada su evolución temporal.

En la figura 2.1,  $\psi^{(0)}(x_0)$  representa los valores discretos de la función de onda en  $x_0$  al tiempo  $t_0 = 0$ , de tal forma que  $\psi^{(40)}(x_4)$ : representa el valor de la función de onda en  $x_4$  al tiempo  $t = t_{40} = 40\Delta t$ , por citar sólo un ejemplo. Además de lo anterior, los valores  $a$  y  $b$  representan el punto inicial y final de la malla respectivamente.

Con lo anterior, el tamaño del paso espacial  $\Delta x$  estará dado por:

$$\Delta x = \left[ \frac{b-a}{M} \right] \quad (2.8)$$

mientras que el paso temporal  $\Delta t$ :

$$\Delta t = \left[ \frac{t_f - t_0}{N} \right] \quad (2.9)$$

Por lo anterior, la malla es uniforme cuando la distancia de sus pasos espacial ( $\Delta x$ ) y temporal ( $\Delta t$ ), es igual en sus respectivos ejes.

### 2.3 El método de diferencias finitas para la parte temporal.

Para llegar a la formulación discreta, utilizamos la expansión en serie de Taylor de la función  $f(z)$  alrededor de los puntos  $z = z_0 + h$  y  $z = z_0 - h$

$$f(z_0 + h) = f(z_0) + h f'(z_0 + h) + \frac{1}{2!} h^2 f''(z_0) + \frac{1}{3!} h^3 f'''(z_0) + \dots \quad (2.10)$$

$$f(z_0 - h) = f(z_0) - h f'(z_0 - h) + \frac{1}{2!} h^2 f''(z_0) - \frac{1}{3!} h^3 f'''(z_0) + \dots \quad (2.11)$$

Sustrayendo (2.10) - (2.11) se tiene:

$$f(z_0 + h) - f(z_0 - h) = 2h f'(z_0) + \frac{2}{3!} h^3 f'''(z_0) + \dots \quad (2.12)$$

Y dividiendo a la expresión anterior entre  $h$ :

$$\frac{f(z_0 + h) - f(z_0 - h)}{2h} = f'(z_0) + \frac{1}{3!} h^2 f'''(z_0) + \dots \quad (2.13)$$

El término del lado izquierdo es equivalente a la derivada de una función  $f$  en el punto  $z_0$  aunado a un término dependiente de  $h^2$  y continuando con un número infinito de términos que no son mostrados.

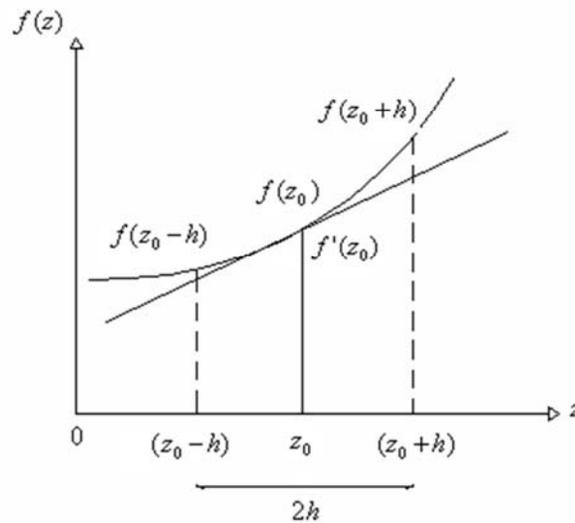
Por lo que, estamos en condiciones de reescribir la expresión (2.13) como:

$$\left. \frac{df(z)}{dz} \right|_{z=z_0} = \frac{f(z_0+h) - f(z_0-h)}{2h} + \mathcal{O}h^2 \quad (2.14)$$

El segundo término del lado derecho de la expresión anterior indica la sucesión de números infinitos no mostrados, en los que el primero de ellos es de potencia cuadrática, el siguiente de potencia cúbica y así sucesivamente a potencias mucho mayores. Estos términos pueden ignorarse si hacemos  $h$  suficientemente pequeña y es razonable proponer una aproximación de la derivada en diferencias centrales tal como:

$$\left. \frac{df(z)}{dz} \right|_{z=z_0} \approx \frac{f(z_0+h) - f(z_0-h)}{2h} \quad (2.15)$$

La derivada de la función  $f(z)$  es valuada entre los puntos  $z = z_0 + h$  y  $z = z_0 - h$ , aproximando el límite cuando  $z \rightarrow z_0$ , por la izquierda y por la derecha tal como se muestra en la figura 2.1. Esta aproximación de derivadas es de segundo orden, dado que las potencias mayores de 2 son ignoradas. Por último, entre más pequeño sea el tamaño de  $h$ , la aproximación de derivada se volverá más exacta.



**Figura 2.1** Representación gráfica de derivada en diferencias centrales.

## 2.4 El Método de R. Kosloff y D. Kosloff para la parte espacial.

La solución numérica de la ecuación de Schrödinger discretizada, dada por la ecuación:

$$i \frac{\partial \psi^{(n)}}{\partial t}(i_1, i_2, i_3, \dots, i_N) = \hat{H}^{(n)} \psi^{(n)}(i_1, i_2, i_3, \dots, i_N) \quad (2.16)$$

Incluye las derivadas espaciales y las derivadas temporales, en la que la aproximación para la derivada espacial utiliza la propiedad de las transformadas de Fourier de tal manera que una derivada en el dominio espacial, multiplicándola por un factor  $iK_{il}$  se convierte en una derivada en el dominio de la frecuencia, donde  $K_{il}$  es el número de onda correspondiente a la coordenada espacial  $l$ . El operador Laplaciano de la ecuación (2.4) es además obtenido ejecutando una transformada de Fourier  $N$ -dimensional en  $\psi^n$  multiplicando el resultado por  $-(K_{i1}^2 + K_{i2}^2 + \dots + K_{iN}^2)$  y ejecutando una transformada inversa hacia el dominio espacial. En la aplicación numérica, las derivadas son calculadas por la transformada rápida de Fourier (FFT).

En particular, para el caso unidimensional, podemos explicar lo anterior con más detalle. Para ello recurrimos a las definiciones de la transformada de Fourier y su transformada inversa:

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{ikx} dx \quad (2.17)$$

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) e^{-ikx} dk \quad (2.18)$$

Tomando (2.18), podemos calcular la derivada de  $f(x)$  con respecto a la posición, lo que nos da:

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{d}{dx} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) e^{-ikx} dk$$

es decir,

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (-ik) F(k) e^{-ikx} dk \quad (2.19)$$

Así que para la segunda derivada espacial, se tiene que:

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (-ik)^2 F(k) e^{-ikx} dk \quad (2.20)$$

Con lo anterior, R. Kosloff y D. Kosloff [10,11] proponen que el algoritmo para evaluar el Laplaciano presente en la Ecuación de Schrödinger consiste en pasar el estado  $F(x,t)$  al espacio de Fourier mediante una transformada directa de Fourier, al resultado, multiplicarlo por  $(-k^2)$  y regresarlo al espacio real con una transformada inversa de Fourier.

## 2.5 Algoritmo numérico para la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo.

Dada la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para el caso unidimensional mencionado anteriormente:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \hat{V}\psi \right] \quad (2.21)$$

donde  $\psi$  es una función de  $x$  y  $t$ , es decir  $\psi(x,t)$ .

Para tomar la derivada parcial de la función  $\psi(x,t)$  con respecto al tiempo, realizamos una aproximación de diferencias finitas a Segundo orden alrededor de un punto  $t \pm \Delta t$ , obteniendo:

$$\psi'(x,t) = \frac{\psi(x,t) - \psi(x,t - \Delta t)}{\Delta t} \quad (2.22)$$

y

$$\psi'(x,t) = \frac{\psi(x,t + \Delta t) - \psi(x,t)}{\Delta t} \quad (2.23)$$

Sumando (2.22) con (2.23) y despejando  $\psi'(x,t)$ :

$$\psi'(x,t) = \frac{\psi(x,t + \Delta t) - \psi(x,t - \Delta t)}{2\Delta t} \quad (2.24)$$

Si a continuación sustituimos la ecuación anterior en el lado izquierdo de la expresión dada en (2.21), se obtiene:

$$\frac{\psi(x,t + \Delta t) - \psi(x,t - \Delta t)}{2\Delta t} = \frac{1}{i\hbar} \left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + \hat{V}(x,t) \psi(x,t) \right] \quad (2.25)$$

Sabemos que  $t = n\Delta t$ , por lo que:

$$\begin{aligned} t + \Delta t &= n\Delta t + \Delta t = \Delta t(n + 1) \\ t - \Delta t &= n\Delta t - \Delta t = \Delta t(n - 1) \end{aligned}$$

Quedando, finalmente la expresión (2.25) escrita como:

$$\frac{\psi(x, \Delta t(n+1)) - \psi(x, \Delta t(n-1))}{2\Delta t} = \frac{1}{i\hbar} \left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + \hat{V}(x, t) \psi(x, t) \right] \quad (2.26)$$

Una manera más cómoda de expresar estos resultados, es utilizar la convención de escribir en el superíndice el valor discreto de la variable temporal y entre paréntesis el valor de la variable espacial, más específicamente:

$$\psi(x, t) \equiv \psi(x, n\Delta t) \equiv \psi^{(n)}(x) \quad (2.27a)$$

$$V(x, t) \equiv V(x, n\Delta t) \equiv V^{(n)}(x) \quad (2.27b)$$

Por lo que al implementar esta nueva formulación, en la parte que involucra la derivada parcial de la ecuación de Schrödinger utilizando diferencias finitas, la expresión (2.26) queda de la siguiente forma:

$$\frac{\psi^{(n+1)}(x) - \psi^{(n-1)}(x)}{2\Delta t} = \frac{1}{i\hbar} \left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^{(n)}(x)}{\partial x^2} + \hat{V}^{(n)}(x) \psi^{(n)}(x) \right] \quad (2.28)$$

de donde podemos despejar  $\psi^{(n+1)}(x)$ , para obtener el esquema numérico que corresponde a la Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, a saber:

$$\psi^{(n+1)}(x) = \psi^{(n-1)}(x) + \frac{2\Delta t}{i\hbar} \left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^{(n)}(x)}{\partial x^2} + \hat{V}^{(n)}(x) \psi^{(n)}(x) \right] \quad (2.29)$$

La ecuación (2.29) nos da el soporte, en una ecuación discreta, para poder estudiar el comportamiento o evolución temporal de cualquier estado cuántico, sujeto a la acción de un potencial  $V(x)$ , el cual puede, aunque no se mencione explícitamente, depender del tiempo, lo que hace sumamente importante esta ecuación resultando, por ello, en la base de todo el trabajo desarrollado en este documento.

Por ejemplo, para el caso en que  $V$  corresponde a un potencial independiente del tiempo los valores  $V^{(n)}$  se mantendrán invariante con respecto al tiempo; pudiendo citar como ejemplo el caso del potencial de un oscilador armónico, donde  $V^{(n)} = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ .

De igual manera, para un potencial  $V$  dependiente del tiempo podemos citar, como un ejemplo muy usual, el correspondiente a un potencial asociado a la interacción de un campo eléctrico  $E$  con el momento dipolar del sistema, el cual tiene la forma  $V^{(n)} = \mu E_0 \text{Cos}(\omega t) = \mu E_0 \text{Cos}(\omega n\hbar)$ .

Debido a que en el esquema numérico dado por la ecuación (2.29) se ha empleado una expresión en diferencias finitas a segundo orden, para iniciar la evolución temporal será necesario tener dos estados previos  $\psi^{(0)}(x)$  y  $\psi^{(1)}(x)$ , siendo que sólo disponemos del primero de ellos.

Para resolver el problema anterior y estar en condiciones de evaluar la evolución temporal, lo que se hace es lo siguiente:

Para conocer el estado  $\psi^{(1)}(x)$ , a partir del estado inicial  $\psi^{(0)}(x)$ , es necesario utilizar (por única vez) un esquema de diferencias finitas a primer orden, que se construye de la siguiente manera:

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \frac{\psi(x,t+\Delta t) - \psi(x,t)}{\Delta t} \quad (2.30)$$

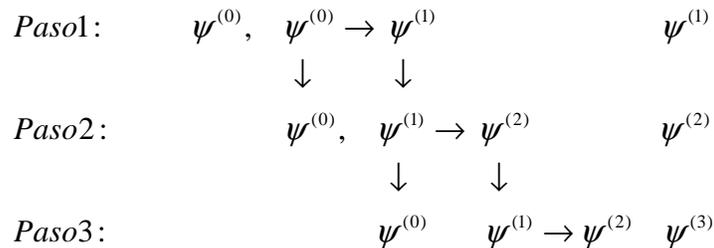
Sustituyendo (2.30) en (2.21):

$$\frac{\psi(x,t+\Delta t) - \psi(x,t)}{\Delta t} = \frac{1}{i\hbar} \left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \hat{V}\psi \right] \quad (2.31)$$

lo que lleva a escribir el esquema numérico dado por:

$$\psi^{(1)}(x) = \psi^{(0)}(x) + \frac{\Delta t}{i\hbar} \left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^{(0)}(x)}{\partial x^2} + \hat{V}\psi^{(0)}(x) \right], \quad \text{para } n = 1. \quad (2.32)$$

Con lo anterior, y a manera de síntesis del algoritmo numérico, se tiene que este algoritmo se puede esquematizar como sigue:





## Capítulo III. EVOLUCIÓN TEMPORAL DE UN PAQUETE DE ONDAS SUJETO A LA ACCIÓN DE UN POTENCIAL NO PERIÓDICO.

En este capítulo presentamos algunos resultados numéricos correspondientes a problemas ampliamente estudiados en la literatura, con la finalidad de mostrar que el método propuesto en el capítulo anterior ofrece resultados acordes con lo predicho por la teoría; en particular, nos centramos en analizar el comportamiento de un paquete de ondas sujeto a un potencial nulo (o de partícula libre) y a uno sujeto a un potencial armónico, variando las condiciones iniciales del paquete de ondas.

Es importante mencionar que el número de pasos temporales realizados en este capítulo y en el siguiente se tomó considerando que el paquete de ondas no llegue a los bordes de la malla de simulación, porque que en caso de hacerlo, produciría un efecto no deseado en los cálculos, debido a las limitaciones del método numérico empleado, como el “aliasing” que se menciona en el Apéndice A, y el cual no es parte del problema físico.

### 3.1 Propagación de un paquete de onda en un potencial de partícula libre.

Estudiar el comportamiento de una partícula cuántica en un potencial cualquiera requiere bastante trabajo y, por ello, dados los objetivos que nos hemos propuesto para esta sección, primeramente nos abocaremos a estudiar el caso más sencillo y a la vez el más instructivo: el de una partícula libre, la cual se mueve sin potencial alguno.

Como anteriormente hemos definido, un paquete de ondas es una superposición lineal de ondas que se desplaza de modo relativamente compacto en el espacio antes de dispersarse. En este apartado revisaremos el caso de una partícula libre, la cual se representa por un paquete de ondas de propagación libre, es decir consideramos que dicha partícula esté sujeta a la acción de un potencial constante independiente del tiempo, de la forma  $V(x) = 0$ .

Por conveniencia, podemos elegir el estado inicial de tal manera que tomamos como la función de onda inicial  $\psi(x,0)$  a un paquete Gaussiano, acorde a la expresión dada en (1.53) y que puede reescribirse como

$$\psi(x,0) = \left( \frac{1}{\pi\sigma^2} \right)^{1/4} e^{ik_0x} e^{-x^2/2\sigma^2}$$

en donde sólo tenemos dependencia espacial y que, de manera general podemos escribir, considerando un desplazamiento del valor central al punto  $x = x_0$ , como:

$$\psi(x,0) = \left( \frac{1}{\pi\sigma^2} \right)^{1/4} e^{ik_0x} e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2} \quad (3.1)$$

De tal forma que esta expresión representa una función Gaussiana con su valor máximo en  $x_0$  y donde  $\sigma$  es la anchura del paquete, medido a la mitad de la altura del máximo punto.

Para tener un paquete en movimiento se requiere que esta función Gaussiana original se multiplique por una onda plana con vector de onda  $k$ . Esto último, debido a que una partícula libre de momento  $p$  está asociada con una onda plana con vector de onda  $k$ , tal que  $p = \hbar k$ .

Para el caso que se muestra en la figura 3.1, el paquete de ondas en cuestión representa a una partícula en el origen de coordenadas a un tiempo inicial  $t_0 = 0$ , el cual estará sujeto a dispersarse en una región con un potencial constante  $V = 0$ , esto es, una partícula que se mueve libremente a través del espacio. Además están considerados los parámetros  $k_0 = 2/1.45$ ,  $\lambda = 1.45\pi$  y  $\sigma = \sqrt{2}/2$  con  $m = 1$  y  $\hbar = 1$ .

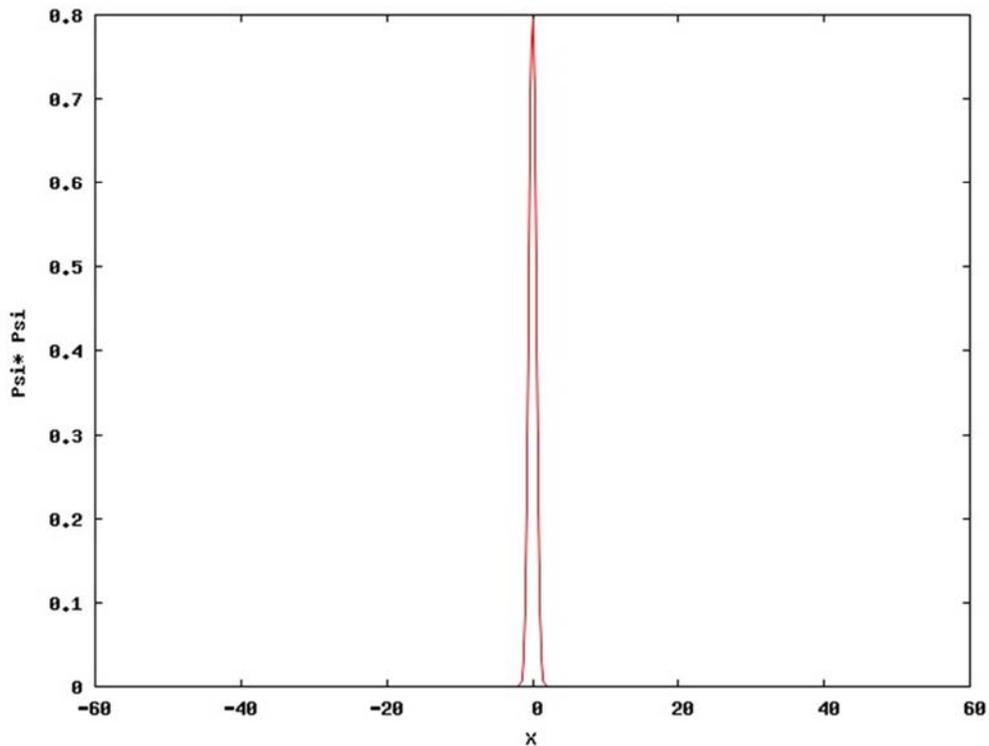


Figura 3.1. Paquete de ondas a un tiempo inicial  $t_0 = 0$ , situado en el origen.

Para un tiempo posterior, la función de onda de la partícula está dada por la forma [21]:

$$\psi(x,t) = A \frac{e^{i\varphi}}{\alpha(t)} e^{ik_0 x} e^{\left\{ \frac{[\beta(t)]^2}{\gamma(t)} \right\}} \quad (3.2)$$

donde:

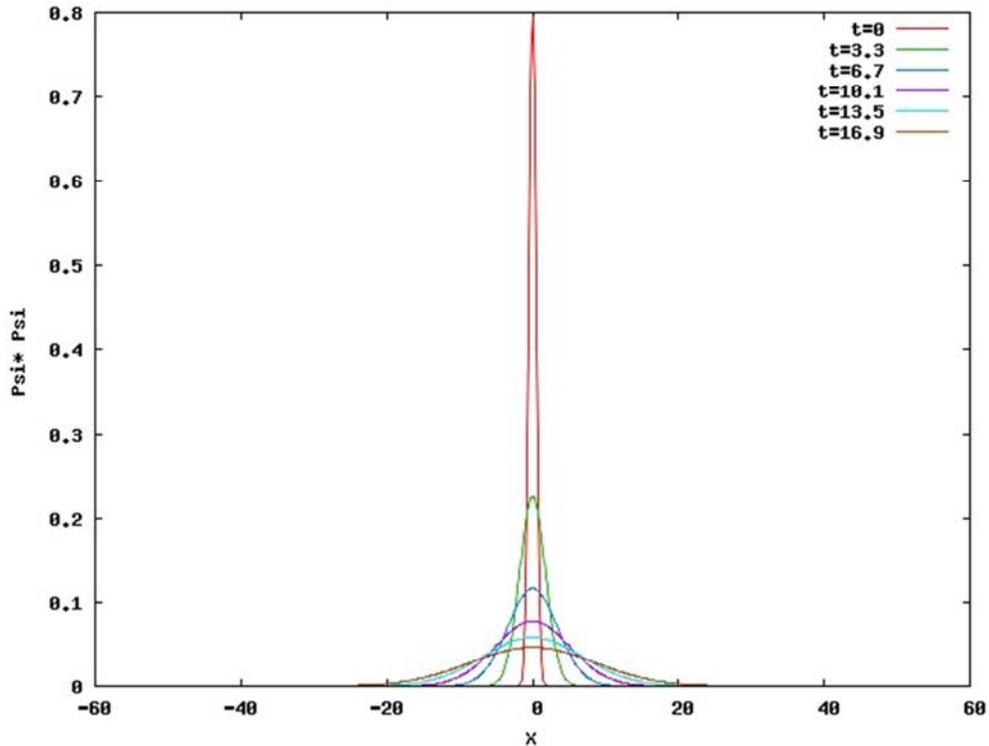
$$A = \left( \frac{2a^2}{\pi} \right)^{1/4}$$

$$\alpha(t) = \left( a^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4} \right)^{1/4}$$

$$\beta(t) = \left( x - \frac{\hbar k_0}{m} t \right)$$

$$\gamma(t) = a^2 - \frac{2i\hbar}{m} t$$

Se hicieron en total 180,000 evoluciones temporales para el paquete de ondas, teniendo un tamaño de la malla temporal  $\Delta t = 0.0001$  y una malla espacial  $\Delta x = 120/1024$ , donde el paquete de ondas no se le dio velocidad inicial alguna, es decir,  $v = 0$ . La figura 3.2 muestra algunas de las instantáneas de la evolución para los diferentes valores temporales:  $t = 0$ ,  $t = 3.3$ ,  $t = 6.7$ ,  $t = 10.1$ ,  $t = 13.5$  y  $t = 16.9$ . Todo esto, recordando que  $t = n \Delta t$ .



**Figura 3.2.** Evolución de un paquete de ondas propagándose en una región de partícula libre ( $V=0$ ). Dicho paquete cuenta con velocidad inicial.

En la figura 3.2 se muestra que el paquete de ondas al evolucionar en el tiempo con una velocidad inicial  $v = 0$ , conserva su máxima amplitud de probabilidad alrededor del punto inicial  $x_0 = 0$

Sin embargo, la amplitud del paquete propagado decrece conforme este evoluciona en el tiempo, lo cual se debe a que la relación de incertidumbre de Heisenberg señala que todo paquete de ondas se dispersará al tener una evolución temporal.

Por otra parte, lo anterior se corroboró al momento de calcular el valor esperado de la posición de la partícula  $\langle x(t) \rangle$  cuyo valor es cero, de tal forma que esto refuerza el hecho de que su valor máximo de amplitud de probabilidad se centra alrededor del punto  $x_0 = 0$  conforme se da la evolución hasta completar un total de 180,000 pasos temporales.

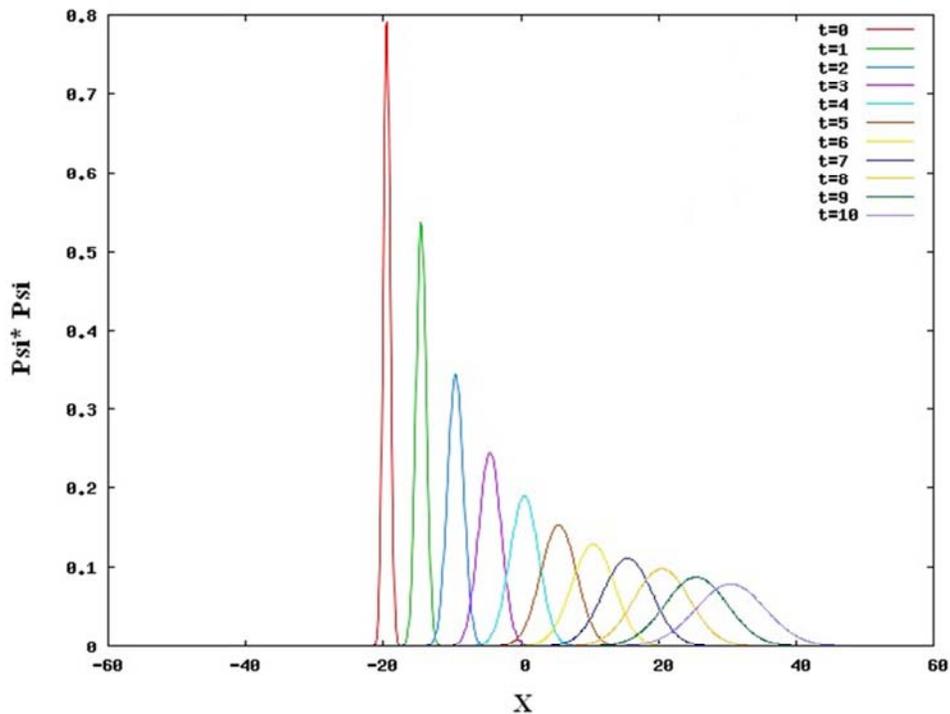
Con los resultados anteriores, pudimos verificar que un paquete de ondas sujeto a un potencial de partícula libre, a pesar de tener una velocidad inicial  $v = 0$ , se dispersará pero conservará su máxima amplitud de probabilidad centrada alrededor de un mismo punto inicial  $x_0$ . Finalmente es importante mencionar que el valor esperado de la energía  $\langle E(t) \rangle$  se conserva para todo tiempo  $t$  en la evolución temporal.

Hasta aquí se ha analizado el comportamiento de un paquete de ondas de tipo Gaussiano con una velocidad  $v = 0$ . Sin embargo, es necesario probar que los resultados del método numérico

planteado en este trabajo se cumplen para velocidades diferentes de cero en este mismo potencial, lo cual se mostrara a continuación en el siguiente apartado.

**Propagación de un paquete de ondas en un potencial de partícula libre con velocidades iniciales diferentes de cero.**

De igual forma que en la sección anterior, considerando los mismos parámetros  $k_0 = 2/1.45$  y  $\sigma = \sqrt{2}/2$  con  $m=1$  y  $\hbar=1$ , se hizo evolucionar un paquete de ondas con un total de 90,000 evoluciones temporales primeramente, donde la partícula parte de una posición inicial en  $x_0 = -20$ , para un tiempo  $t_0 = 0$ . Las diferentes velocidades iniciales, de la forma  $v = p/m$  con que se dio impulso al paquete de ondas sujeto a un potencial de partícula libre planteado al inicio de este capítulo fueron de 50, 100 y 200 unidades arbitrarias tal como se mostrará en las siguientes figuras, al igual que las observables de la posición  $\langle x(t) \rangle$ , el momento  $\langle p(t) \rangle$  y la energía del sistema  $\langle E(t) \rangle$ .

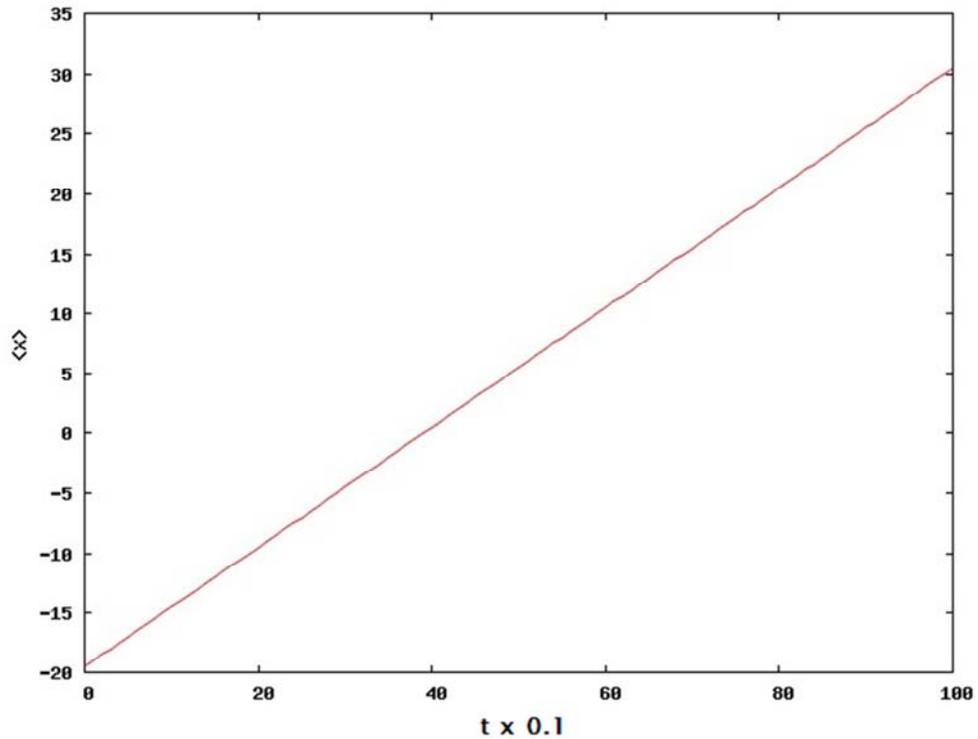


**Figura 3.3.** Evolución de un paquete de onda Gaussiano en un potencial de partícula libre con una velocidad inicial  $v=50$ , a un tiempo inicial  $t_0=0$  y con una posición inicial  $x_0=-20$ .

En la figura 3.3 se muestra que el paquete de ondas evoluciona desde un punto inicial  $x_0 = -20$ , a partir de un tiempo  $t_0 = 0$ , observándose que la amplitud máxima de dicho paquete se mueve, decreciendo en amplitud y ensanchándose conforme va evolucionando hasta un tiempo final de  $t_f = 10$ .

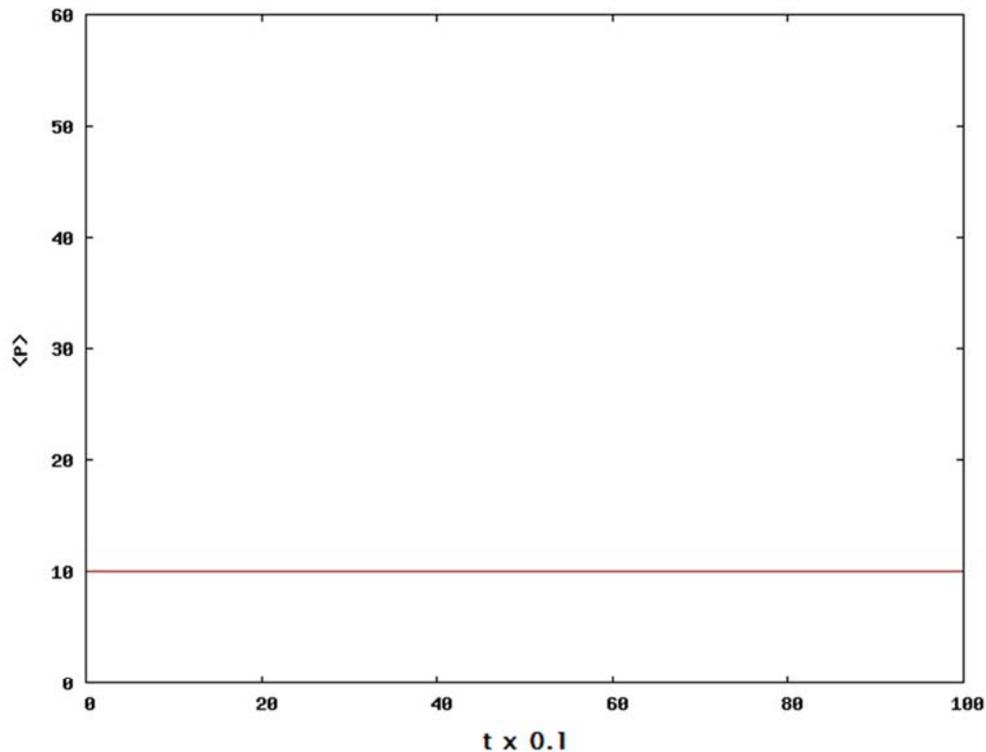
Por otra parte, corroborando lo anterior, en la figura 3.4 se muestra como el valor esperado de la posición de la partícula, que inicialmente se centra alrededor del punto  $x_0 = -20$ , presenta una

dispersión hasta llegar a un punto final  $x_f = 25$  para un tiempo  $t_f = 10$ , mostrando en su evolución temporal un comportamiento lineal.



**Figura 3.4.** Valor esperado de la posición  $\langle x(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano sujeto a un potencial de partícula libre para 100,000 pasos temporales, todo esto con una velocidad inicial  $v = 50$ .

Para el valor esperado del momento lineal  $\langle p(t) \rangle$  podemos observar que describe un comportamiento invariable conforme el paquete de ondas evoluciona en el tiempo, de tal manera que el momento lineal se mantiene constante con  $\langle p(t) \rangle = 10$ .

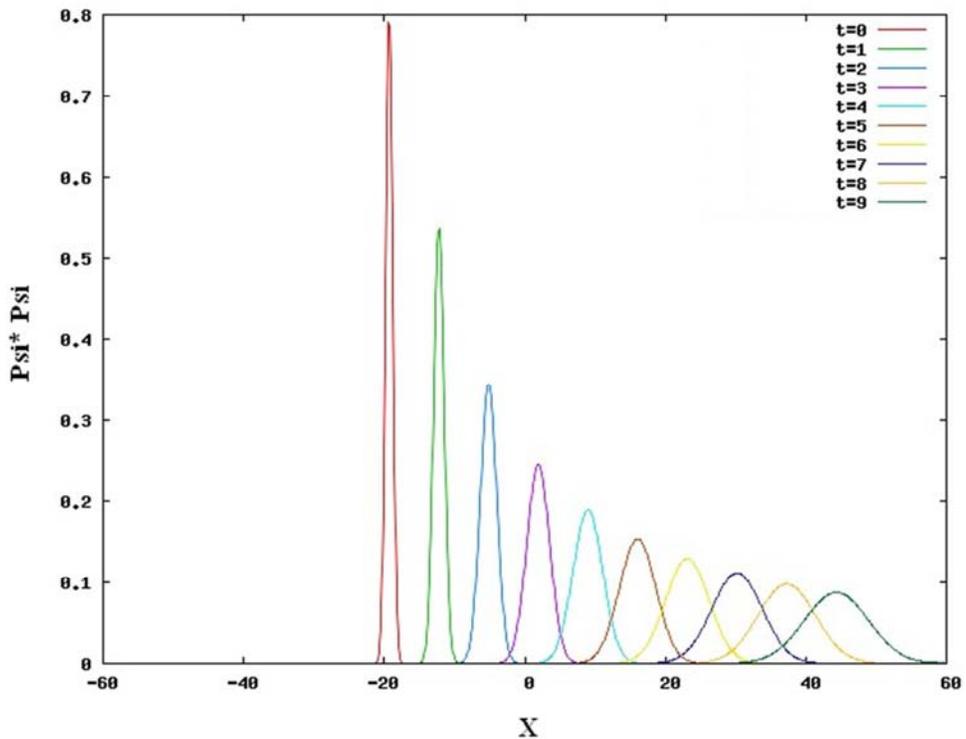


**Figura 3.5.** Valor esperado del momento  $\langle p(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano sujeto a un potencial de partícula libre para 100,000 pasos temporales, todo esto con una velocidad inicial  $v = 50$ .

De igual manera, para el valor esperado de la energía total del sistema, tenemos que se mantiene constante con  $\langle E(t) \rangle = 50$ , es decir, se conserva conforme el paquete de ondas evoluciona en el tiempo.

Partiendo de la relación clásica de energía  $E = T + V$ , donde  $T$  representa a la energía cinética y  $V$  a la energía potencial de un sistema. Para el caso de un potencial de partícula libre, podemos observar que  $E = T$ , donde  $T = \frac{p^2}{2m}$ , además  $p = \hbar k$ , y tomando en cuenta para nuestro algoritmo numérico las consideraciones iniciales de  $\hbar = 1$ ,  $m = 1$  podemos relacionar a la velocidad inicial del paquete de ondas con la energía promedio del sistema de tal manera que  $v = k = \sqrt{2E}$ .

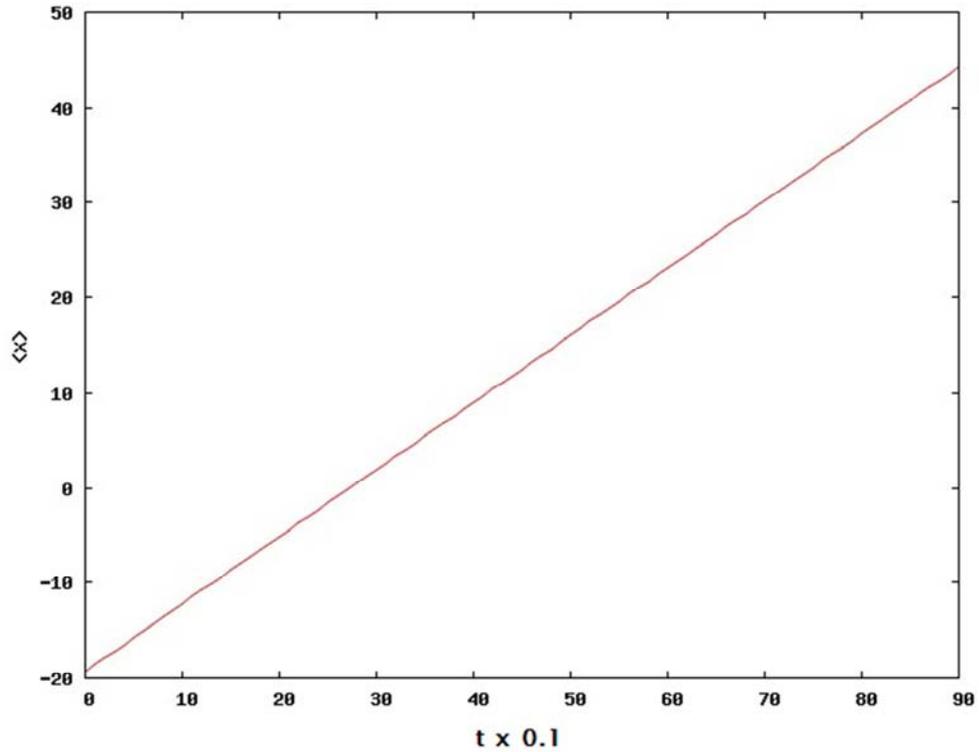
Para comprobar lo anterior, realizamos una evolución temporal más para este tipo de potencial de partícula libre, utilizando los parámetros anteriores, únicamente haciendo variar la velocidad inicial a un valor de  $v = 100$ , tal como se muestra a continuación en la siguiente gráfica.



**Figura 3.6.** Evolución de un paquete de onda Gaussiano en un potencial de partícula libre con una velocidad inicial  $v=100$ , a un tiempo inicial  $t_0=0$  y con una posición inicial  $x_0=-20$ .

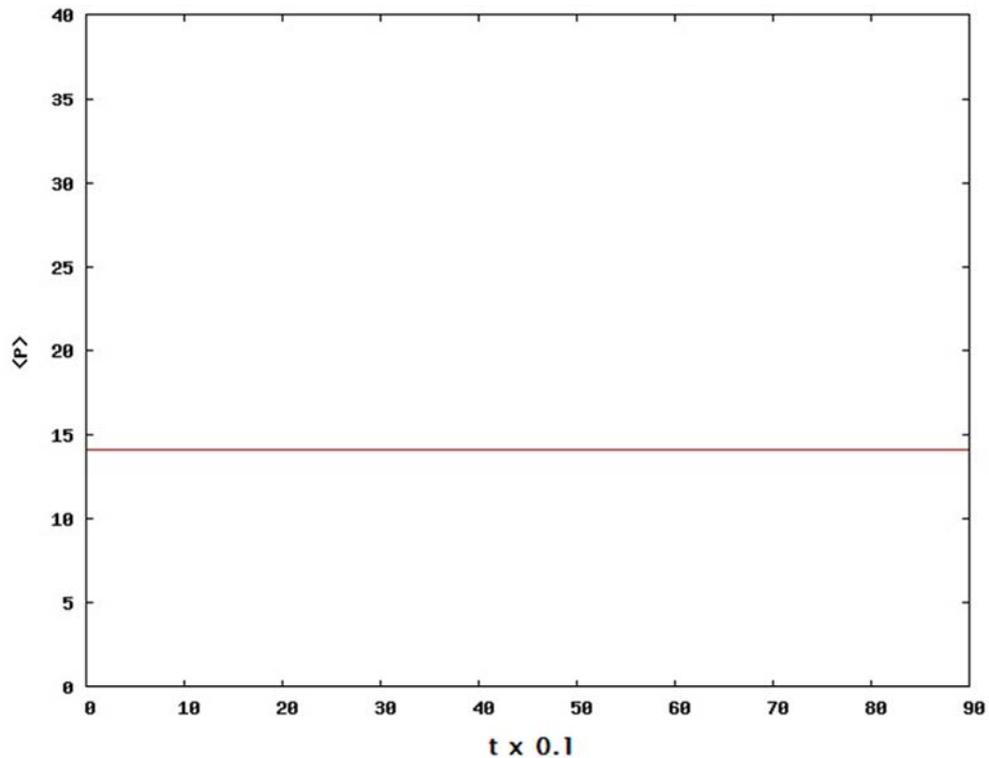
En la gráfica anterior es posible observar que el paquete de ondas, el cual evoluciona desde un punto inicial  $x_0 = -20$  en un instante  $t_0 = 0$ , hasta llegar a  $x_f = 47$  en un tiempo  $t_f = 9$ , pudiendo observarse que el paquete evoluciona de igual forma que en el caso anterior, advirtiéndose que la amplitud máxima de dicho paquete se mueve hacia la derecha, decreciendo en amplitud y ensanchándose al dispersarse, únicamente recorriendo distancias mayores en tiempos menores con respecto al caso anterior de  $v = 50$ .

Realizando una gráfica del valor esperado de la posición  $\langle x(t) \rangle$  contra el número de pasos temporales encontramos de igual forma que en los casos anteriormente analizados, que la partícula describe un comportamiento lineal desde el punto inicial  $x_0 = -20$ , hasta un punto final  $x_f = 50$  en un tiempo  $t_f = 10$ .



**Figura 3.7.** Valor esperado de la posición  $\langle x(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano sujeto a un potencial de partícula libre para 90,000 pasos temporales, todo esto con una velocidad inicial  $v = 100$ .

Por otra parte, se observa que el valor esperado del momento lineal  $\langle p(t) \rangle$  describe un comportamiento constante en el tiempo cuando el paquete de ondas evoluciona, de tal manera que  $\langle p(t) \rangle = \sqrt{200}$ . De esta misma forma, el valor esperado de la energía  $\langle E(t) \rangle$  del sistema se conserva con un valor  $\langle E(t) \rangle = 100$ , dándose de nuevo la relación  $p = \sqrt{2E}$ , esto es tomando en cuenta que  $\hbar = 1$ ,  $m = 1$ . Todo esto tal como se muestra a continuación en la figura 3.8.

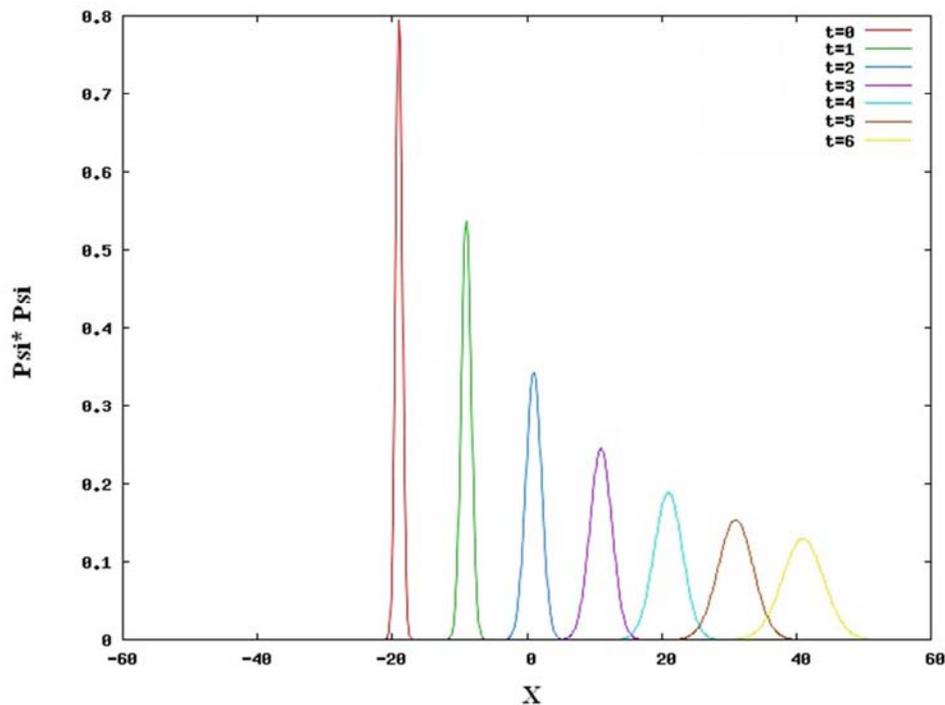


**Figura 3.8.** Valor esperado del momento  $\langle p(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano sujeto a un potencial de partícula libre para 90,000 pasos temporales, todo esto con una velocidad inicial  $v = 100$ .

En el cálculo del valor esperado de la energía total del sistema, se ha verificado que se mantiene constante con  $\langle E(t) \rangle = 100$ , es decir, la energía total del sistema se conserva.

Continuando con la evolución de un paquete de ondas de tipo Gaussiano en un potencial de partícula libre para velocidades diferentes de cero, finalmente se presenta la evolución temporal de dicho paquete de ondas con una velocidad inicial  $v = 200$ .

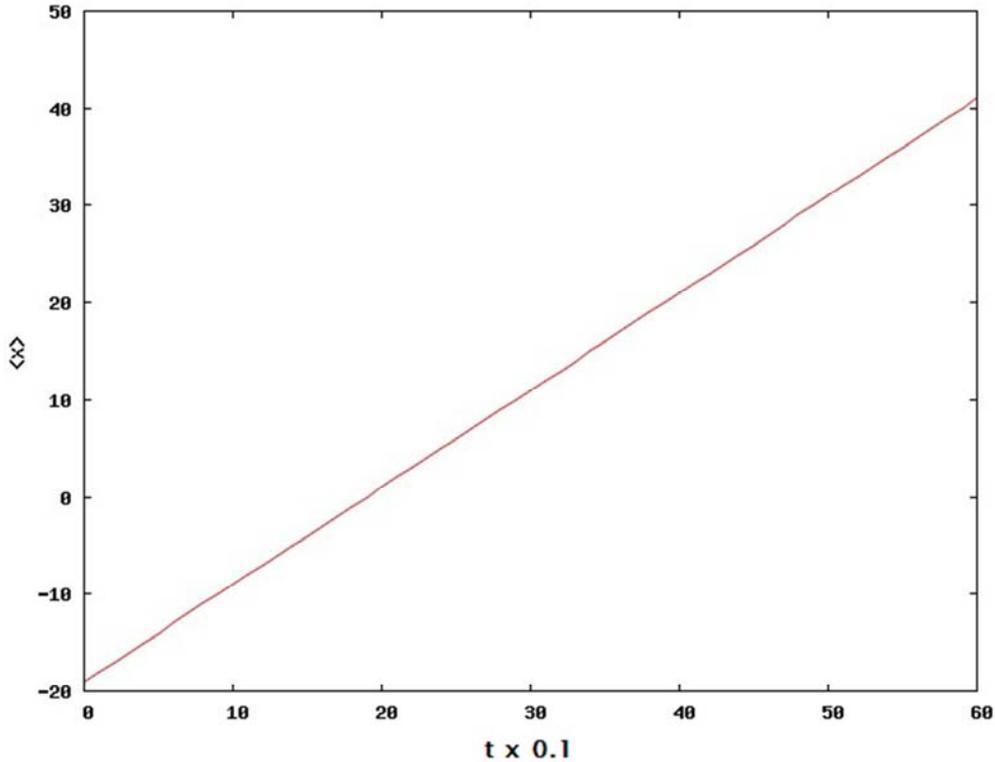
En la figura 3.9 el paquete de ondas evoluciona desde un punto inicial  $x_0 = -20$  en el instante  $t_0 = 0$ , hasta llegar a  $x_f = 42$  en un tiempo  $t_f = 6$ , pudiendo observarse que el paquete evoluciona de igual forma que en el caso anterior, observándose que la amplitud máxima de dicho paquete se mueve hacia la derecha, decrece en amplitud y continua ensanchándose a medida que recorre mayores distancias en tiempos menores que en el caso anterior, todo esto con una velocidad constante  $v = 200$ .



**Figura 3.9.** Evolución de un paquete de onda Gaussiano en un potencial de partícula libre con una velocidad inicial  $v = 200$ , a un tiempo inicial  $t_0 = 0$  y con una posición inicial  $x_0 = -20$ .

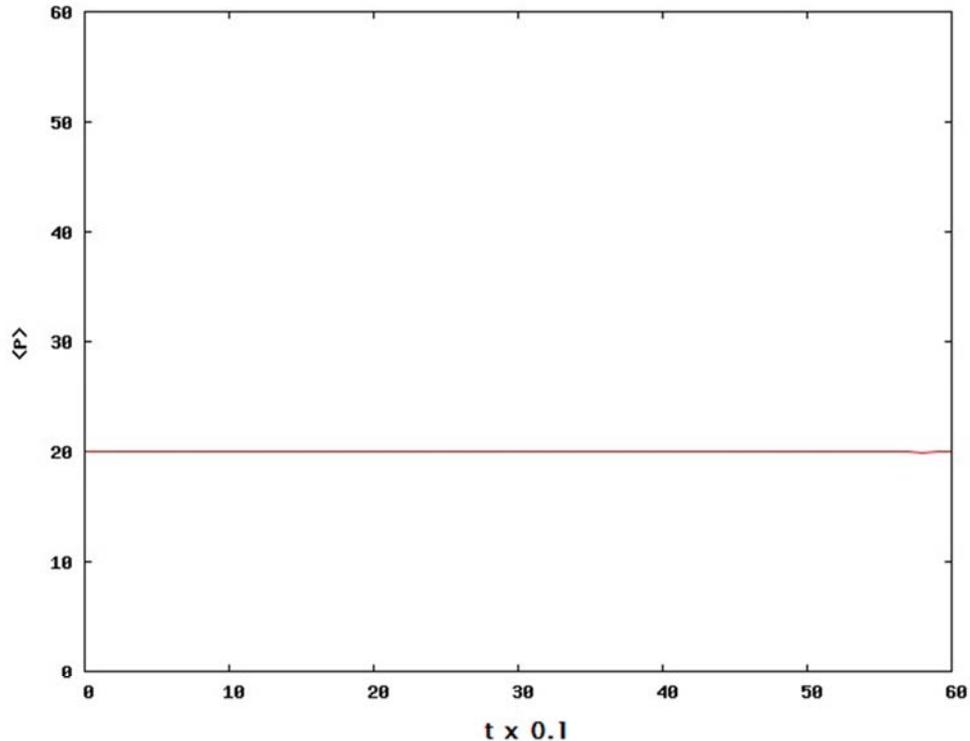
La gráfica del valor esperado de la posición  $\langle x(t) \rangle$  de acuerdo a la evolución temporal del paquete de ondas, refuerza el comentario del párrafo anterior, donde señala la evolución temporal

de dicho paquete desde un punto inicial  $x_0 = -20$ , hasta un punto final  $x_f = -42$ , todo esto en un tiempo  $t_f = 60$ , corroborando el comportamiento lineal en su evolución y verificando nuevamente que el paquete recorre mayores distancias en menor tiempo conforme su velocidad es mayor.



**Figura 3.10.** Valor esperado de la posición  $\langle x(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano sujeto a un potencial de partícula libre para 60,000 pasos temporales, todo esto con una velocidad inicial  $v = 200$ .

El valor esperado del momento lineal  $\langle p(t) \rangle$ , de igual forma que en los casos anteriores, describe un comportamiento constante en el tiempo cuando el paquete de ondas evoluciona, de tal manera que  $\langle p(t) \rangle = 20$  cuando  $\langle E(t) \rangle = 200$ . Esto es para una evolución de 60,000 pasos temporales.



**Figura 3.11.** Valor esperado del momento  $\langle p(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano sujeto a un potencial de partícula libre para 60,000 pasos temporales, todo esto con una velocidad inicial  $v = 200$ .

El valor esperado de la energía en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano sujeto a un potencial de partícula libre para 60,000 pasos temporales, todo esto con una velocidad inicial  $v = 100$  tiene un valor de  $\langle E(t) \rangle = 200$ .

Con lo anterior, hemos verificado que el método planteado en este trabajo se cumple para el caso de un paquete de ondas sujeto a un potencial de partícula libre, en el cual se observa en su evolución temporal, que a una velocidad constante describe un comportamiento de tipo movimiento rectilíneo uniforme, donde los valores esperados del momento lineal y la energía total del sistema se conserva tal como se esperaba. Y dado que el método es factible en este tipo de potenciales más sencillos, pasamos al caso de una partícula sujeta a un potencial de oscilador armónico, el cual representa un estudio importante para la física.

### 3.2 Propagación de un paquete de onda en un potencial de oscilador armónico.

Actualmente, un gran número de sistemas son gobernados por las ecuaciones del oscilador armónico. Por lo que los resultados de su estudio son aplicables a algunos casos en la física,

especialmente a aquellos concernientes a oscilaciones pequeñas de un sistema en la vecindad de un punto de equilibrio estable, es decir, donde el valor de la energía potencial es un mínimo. Algunos de estos ejemplos, por citar algunos y puntualizar su importancia física son: las vibraciones de los átomos de una molécula alrededor de su posición de equilibrio, las oscilaciones de átomos o iones de una red cristalina (fonones), etc.

En esta sección, el objetivo general es entender y explicar la evolución temporal de un paquete de ondas de tipo Gaussiano, el cual estará sujeto a un potencial de tipo oscilador armónico y calcular los valores esperados de posición  $\langle x(t) \rangle$ , momento  $\langle p(t) \rangle$  y energía  $\langle E(t) \rangle$ .

Para describir el potencial de oscilador armónico al cual estará sujeto el paquete de ondas planteado inicialmente, consideraremos el movimiento oscilatorio armónico de manera cuantitativa a partir del concepto de una masa que se desplaza una pequeña distancia  $x$  a partir del equilibrio, donde un resorte ejerce una fuerza sobre esta masa  $m$ , tal como se describe en los libros de texto de física básica:

$$F = -kx \quad (3.3)$$

La cual es una fuerza restauradora lineal, puesto que es linealmente proporcional al desplazamiento y dirigida hacia la posición de equilibrio.

Aplicando la Segunda Ley de Newton a una partícula de masa  $m$  sujeta a una fuerza dada por la ley de Hooke:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -kx \quad (3.4)$$

Cuyas soluciones son de tipo oscilatorio y de la forma:

$$x(t) = A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t) \quad (3.5)$$

donde  $\omega = \sqrt{k/m}$ , es la frecuencia angular de oscilación.

Y dado que la fuerza en términos del potencial puede ser planteada como  $F = -\nabla V$ , el potencial de oscilador armónico, en términos de una constante de restitución  $k = m\omega^2$ , puede ser expresado como:

$$V(x) = \frac{1}{2} k x^2 \quad (3.6)$$

Con lo anterior, podemos describir a la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, de acuerdo a la expresión (1.7), para un potencial de oscilador armónico de la forma [9]:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = \left( \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} k x^2 \right) \psi(x,t) \quad (3.7)$$

Dicho potencial se muestra en la figura 3.12 donde estamos considerando  $m = 1$  y  $\omega^2 = 8$ .

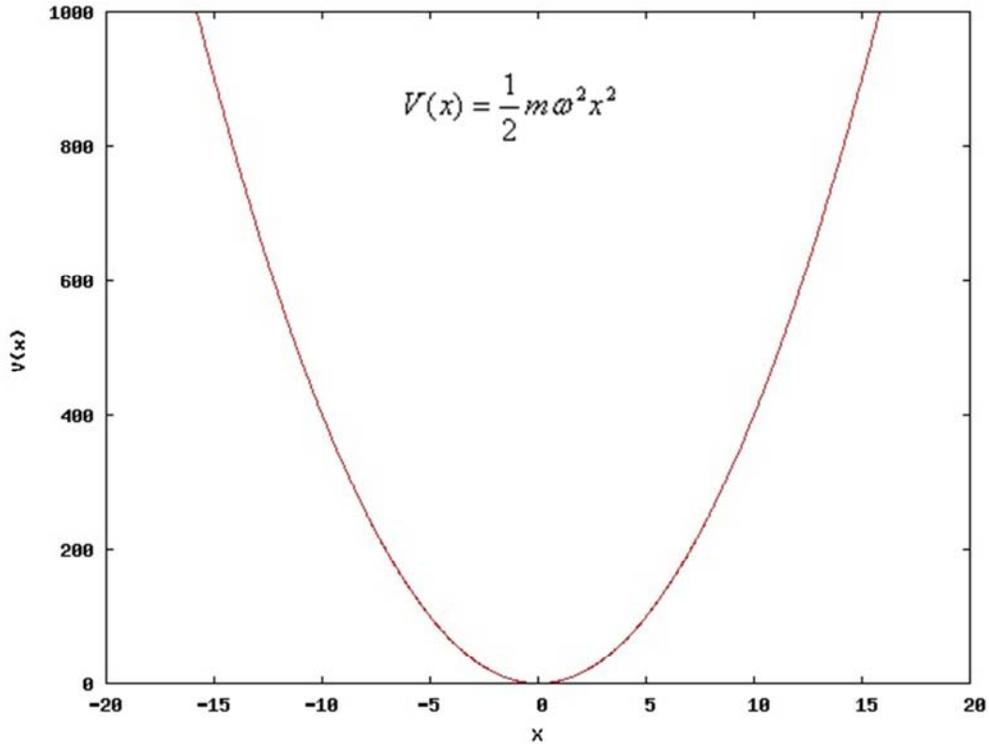


Figura 3.12. Potencial de oscilador armónico con un mínimo en el punto  $x_0 = 0$ .

Tomando en cuenta que la función de onda de una partícula desplazada en el estado base está dada por [9]:

$$\psi(x,0) = \frac{\alpha^{1/2}}{\pi^{1/4}} e^{-(1/2)\alpha^2(x-x_0)^2} \quad (3.9)$$

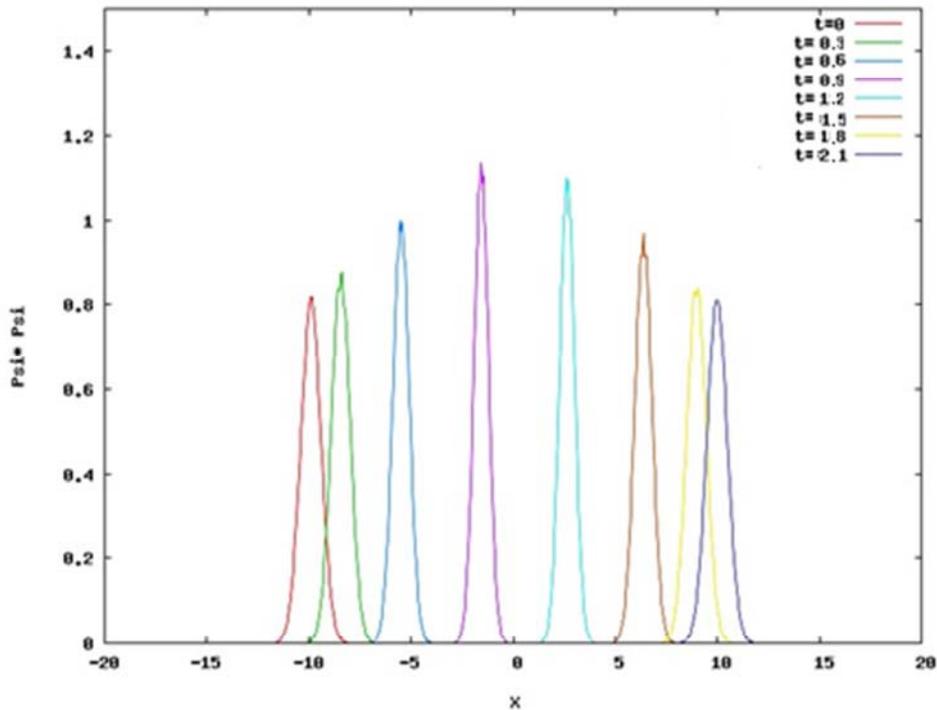
donde  $\alpha = mk/\hbar^2$  ,  $\omega^2 = k/m$  y la constante  $x_0$  se toma como el valor central de la partícula.

La expresión para un tiempo posterior de este paquete de ondas está dada por [9]:

$$\psi(x,t) = \frac{\alpha^{1/2}}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{(1/2)(\xi - \xi_0 \cos \omega t)^2}{1 + \xi^2 \xi_0^2 \sin^2 \omega t} - i \left( \frac{1}{2} + \xi \xi_0 \sin \omega t - \frac{1}{4} + \xi_0^2 \sin 2\omega t \right)} \quad (3.10)$$

donde  $\xi_0 = \alpha x_0$  y  $\xi = \alpha x$

En este trabajo, se hizo evolucionar un paquete de ondas, donde la partícula inicia su recorrido en un punto inicial  $x_0 = -10$  a un tiempo  $t_0 = 0$  en una malla espacial con parámetros  $x \in [x_0, x_f] = [-60, 60]$ , todo esto a una velocidad inicial  $v = 0$ , teniendo solamente un desplazamiento inicial respecto al mínimo del potencial. Su evolución temporal se muestra en la figura 3.18 para  $t = n\Delta t$ , donde el tamaño de la malla espacial es de  $\Delta t = 0.0001$  y con un total de 100,000 pasos temporales, donde se muestran  $n = 0, 3000, 6000, 9000, 12000, \dots, 21000$ . Además,  $\hbar = m = 1$  y  $\omega^2 = 8$ .

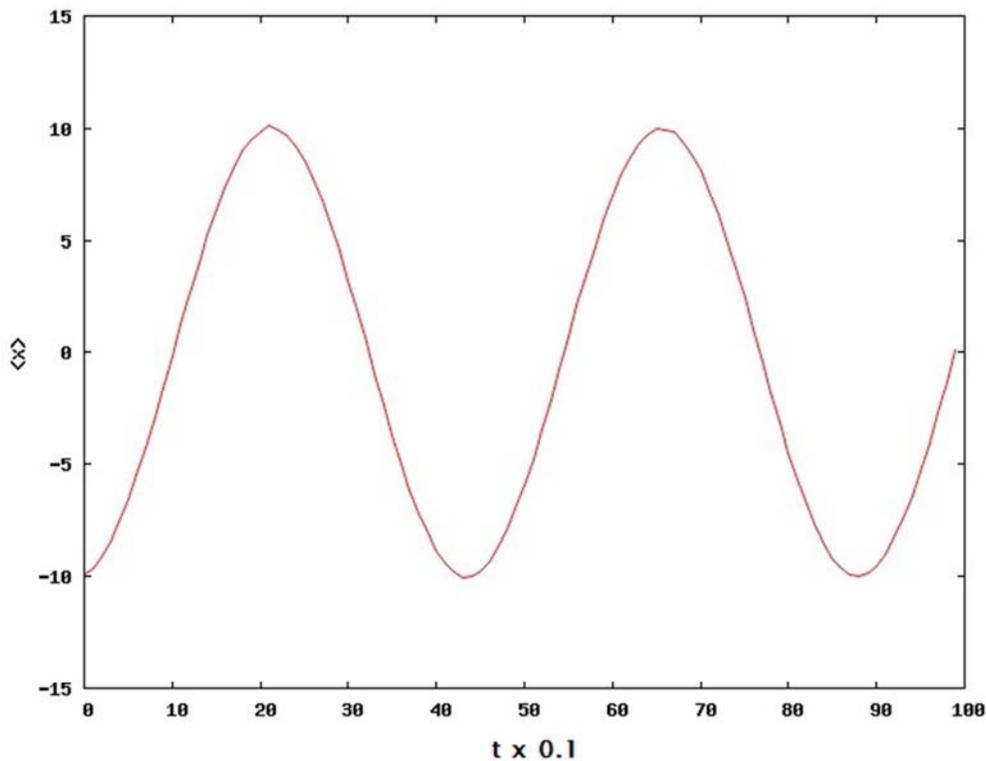


**Figura 3.13.** Evolución de un paquete de onda Gaussiano sujeto a un potencial de oscilador armónico. La evolución da comienzo en el punto  $x_0=-10$  a un tiempo  $t_0=0$  y una velocidad inicial  $v=0$ .

Además, es posible observar como la amplitud de probabilidad del paquete de ondas es mínima cerca de los puntos de retroceso  $x = \pm 10$ , en los que la velocidad del movimiento se anula. Por el contrario, en el punto  $x = 0$ , la partícula tiene su velocidad máxima y la probabilidad de encontrarla allí es máxima.

Lo anterior, también puede corroborarse en la gráfica de la figura 3.14 donde el paquete de ondas sujeto al potencial de oscilador armónico, presenta en su evolución como punto inicial  $x_0 = -10$  a un tiempo  $t_0 = 0$ , a una velocidad inicial  $v = 0$ , se desplaza desde tal punto hasta llegar a un punto final  $x_f = 10$ , y de nuevo regresar al punto de origen en diferentes tiempos.

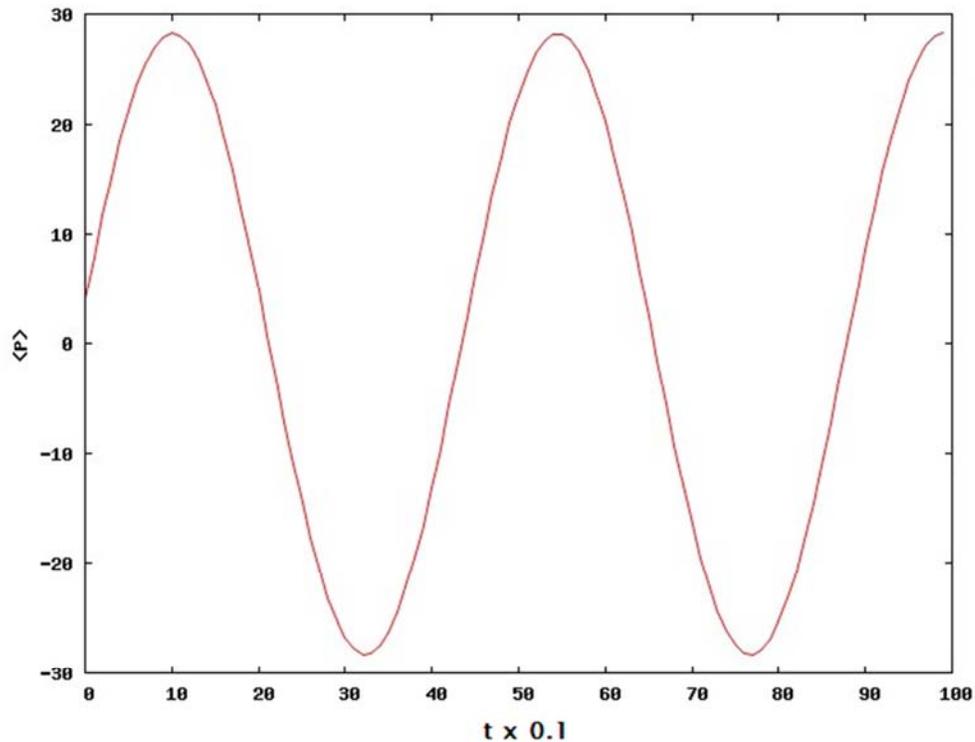
Se observa que en tiempos posteriores a  $t_0 = 0$ , para  $t = 20.84 \times 10^{-4}$ ,  $t = 43.02 \times 10^{-4}$ ,  $t = 65.56 \times 10^{-4}$  y  $t = 87.92 \times 10^{-4}$ , los cuales representan otros puntos de retorno para esta evolución. En dichos puntos, además, se encuentra posicionado el paquete de ondas en el estado de máxima energía del potencial. Además el paquete de ondas está en los puntos de energía mínima del potencial para los tiempos  $t = 10.11 \times 10^{-4}$ ,  $t = 32.31 \times 10^{-4}$ ,  $t = 54.52 \times 10^{-4}$ ,  $t = 76.72 \times 10^{-4}$  y  $t = 98.94 \times 10^{-4}$ .



**Figura 3.14.** Valor esperado de la posición  $\langle x(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de onda Gaussiano sujeto a un potencial de oscilador armónico con una velocidad inicial  $v = 0$ .

Cabe mencionar que el valor esperado de la posición  $\langle x(t) \rangle$ , oscila armónicamente, verificándose en las soluciones de la ecuación diferencial para el oscilador armónico clásico, tal como la expresión (3.5), donde su solución presenta una oscilación con frecuencia  $\omega$ .

Por otra parte, al graficar el valor esperado del momento lineal  $\langle p(t) \rangle$  en la evolución de este paquete de ondas sujeto a un potencial armónico, se observa de igual forma, un comportamiento oscilatorio, tal como se muestra en la figura 3.15.



**Figura 3.15.** Valor esperado del momento  $\langle p(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de onda Gaussiano sujeto a un potencial de oscilador armónico con una velocidad inicial  $v = 0$ .

Es posible observar para tiempos mayores que  $t_0 = 0$  como la amplitud de probabilidad del paquete de ondas es mínima cerca de los puntos de retroceso  $x = \pm 10$ , en los que la velocidad del movimiento se anula. Por el contrario, en un entorno del punto  $x = 0$ , la partícula tiene su velocidad máxima y la probabilidad de encontrarla allí es máxima, tal como se puede verificar en el análisis de la figura 3.15, para una evolución temporal total de 100,000 pasos temporales.

La energía total del sistema se conserva para todo tiempo  $t$  con un valor de  $\langle E(t) \rangle = 400$ . Esto es, dado que en el inicio de su evolución a un tiempo  $t_0 = 0$ , el paquete de ondas cuenta con una energía potencial promedio máxima y con una energía cinética promedio nula y conforme su evolución temporal aumenta, el paquete “pierde” energía potencial y “gana” energía cinética, estableciendo su mínimo de energía potencial promedio en el punto  $x_0 = 0$ , con  $V = 0$  y su máximo de energía cinética promedio, en un tiempo  $t = 10$ , por citar un ejemplo. Posteriormente el paquete de ondas disminuye su velocidad y por ende, su momento y energía cinética promedio, aumentando su energía potencial máxima hasta llegar al punto de retorno  $x_0 = 10$ .

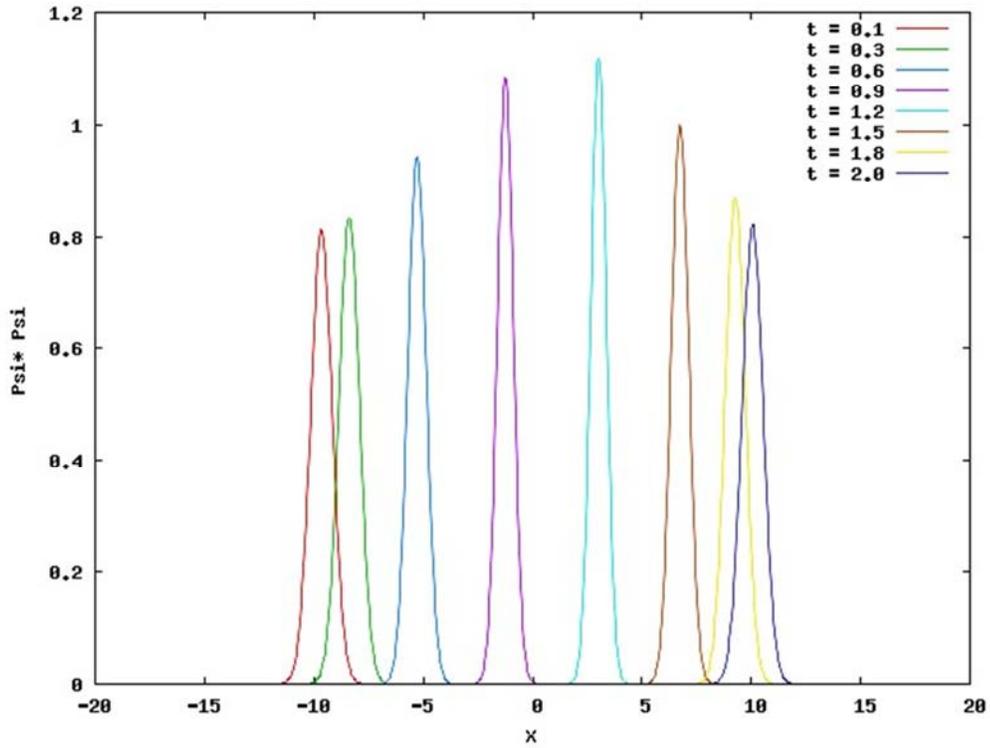
Hasta este momento se ha presentado la evolución de un paquete de ondas sujeto a un potencial de oscilador armónico con una velocidad inicial  $v = 0$ . Se ha observado comportamientos esperados en su evolución temporal, tales como los comportamientos oscilatorios en el cálculo de los valores esperados de posición  $\langle x(t) \rangle$  y momento lineal  $\langle p(t) \rangle$  por ejemplo, al igual que la conservación de la energía total del sistema. Sin embargo, para corroborar que este método funciona en este tipo de potencial, y es posible obtener comportamientos similares a los tratados

en esta sección, se consideró necesario estudiar un paquete de ondas, con velocidades diferentes de cero, tal como se muestra a continuación.

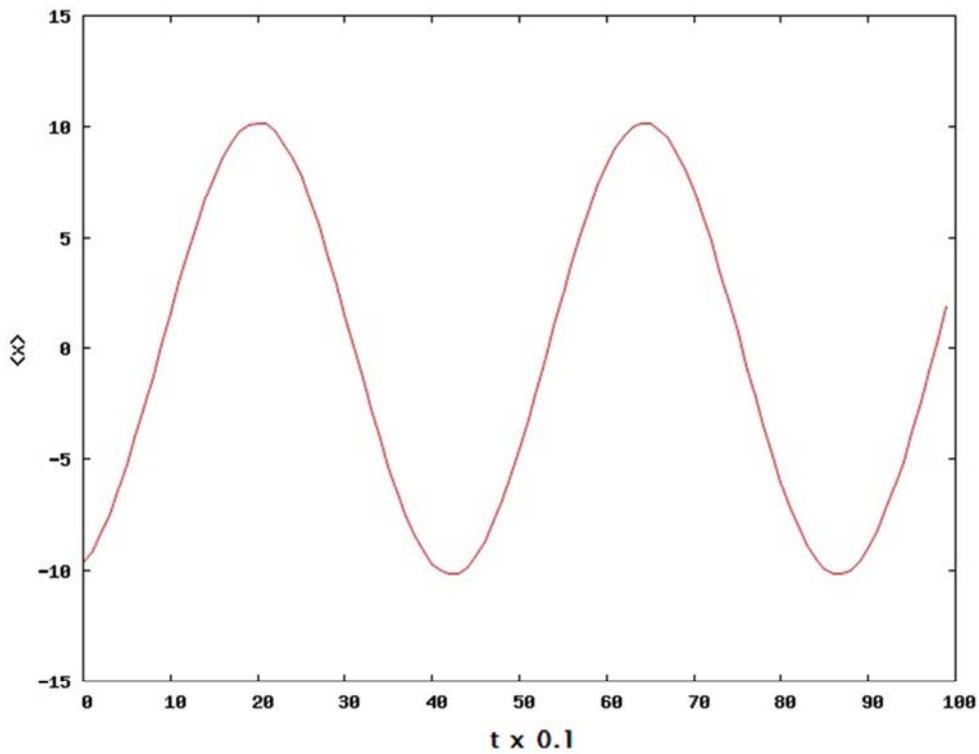
### **Propagación de un paquete de ondas en un potencial de oscilador armónico con velocidades iniciales diferentes de cero.**

En esta sección se muestra la evolución de un paquete de ondas de tipo Gaussiano sujeto a un potencial de oscilador armónico, con velocidades iniciales de  $v = 5$ ,  $v = 10$  y  $v = 20$ , todas estas en unidades arbitrarias. Se llevó a cabo un total de 100,000 evoluciones temporales en cada uno de ellas, donde a un tiempo  $t_0 = 0$ , la partícula dio inicio a su movimiento en el punto  $x_0 = -10$ . Se hicieron cálculos para una malla espacial con parámetros  $x \in [x_0, x_f] = [-20, 20]$  y cuyo tamaño es de  $\Delta x = 40/1024$ . Cabe mencionar que los parámetros utilizados en esta simulación fueron  $\hbar = m = 1$  y  $\omega^2 = 8$ , de igual forma que el caso anterior. Posteriormente, se calcularon los valores de expectación de la posición y el momento,  $\langle x(t) \rangle$  y  $\langle p(t) \rangle$ , respectivamente; todo esto con la finalidad de verificar que existen comportamientos oscilatorios y que están relacionados entre sí. Además se verifica que el valor esperado de la energía  $\langle E(t) \rangle$  del sistema es constante para todo tiempo  $t$ . Lo anterior se muestra en las siguientes gráficas.

Para iniciar, se hace un análisis para el mismo paquete de ondas sujeto a un potencial de oscilador armónico que hemos venido estudiando en esta sección, únicamente cambiando a una velocidad inicial diferente de cero con  $v = 5$  para un tiempo de  $t_0 = 0$ , todo esto en una posición en  $x_0 = -10$ . En la figura 3.16 se muestra su evolución temporal para 100,000 pasos temporales, verificando como su amplitud de probabilidad varía con el tiempo y además, con la figura 3.17 se muestra el valor esperado de la posición de este paquete de ondas en su evolución temporal.



**Figura 3.16.** Evolución de un paquete de onda Gaussiano sujeto a un potencial de oscilador armónico. La evolución da comienzo en el punto inicial  $x_0 = -10$  a un tiempo  $t_0 = 0$ , a una velocidad inicial  $v = 5$ .



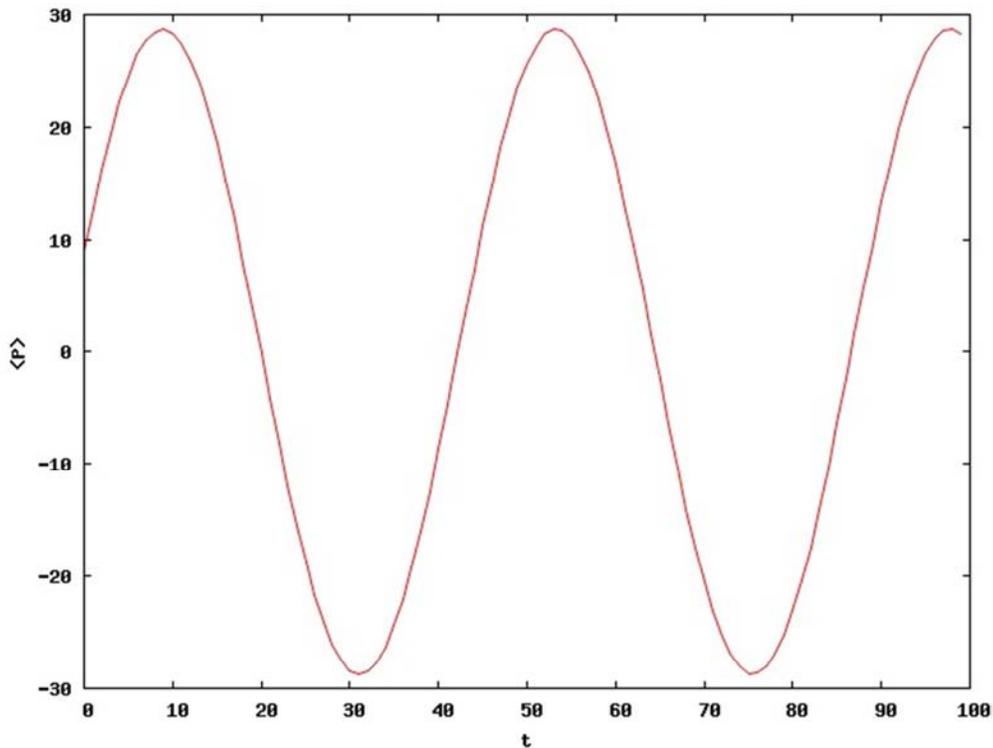
**Figura 3.17.** Valor esperado de la posición  $\langle x(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de onda Gaussiano sujeto a un potencial de oscilador armónico con una velocidad inicial  $v = 5$ .

Haciendo un comparativo de las figuras 3.16 y 3.17, es posible determinar que el paquete de ondas presenta sus puntos de retorno en  $x = \pm 10.15$  para los tiempos  $t = 19.96 \times 10^{-4}$ ,  $t = 42.18 \times 10^{-4}$ ,  $t = 64.38 \times 10^{-4}$  y  $t = 86.60 \times 10^{-4}$ , observándose que en tales instantes que su amplitud de probabilidad es mínima.

Por otra parte, en los tiempos  $t = 9.00 \times 10^{-4}$ ,  $t = 30.99 \times 10^{-4}$ ,  $t = 53.40 \times 10^{-4}$ ,  $t = 75.22 \times 10^{-4}$  y  $t = 97.76 \times 10^{-4}$  está en la parte de mínima energía del potencial, teniendo su máxima amplitud de probabilidad el paquete de ondas de encontrarse en esa región. Y además su amplitud para los valores medios de la posición  $\langle x(t) \rangle$  es de tipo oscilatorio, tal como se esperaba.

Para el cálculo del valor esperado del momento lineal  $\langle p(t) \rangle$ , podemos corroborar que existe un comportamiento de tipo oscilatorio; además, en los puntos de retorno mencionados en el párrafo anterior, se verifica que la velocidad del paquete de ondas es nula.

Todo esto, dado que la energía cinética promedio del paquete de ondas es mínima y su energía potencial es máxima. Para los tiempos anteriormente mencionados donde el paquete de ondas se localiza en el mínimo de potencial, su velocidad es máxima, tal como se puede observar en la figura 3.18.

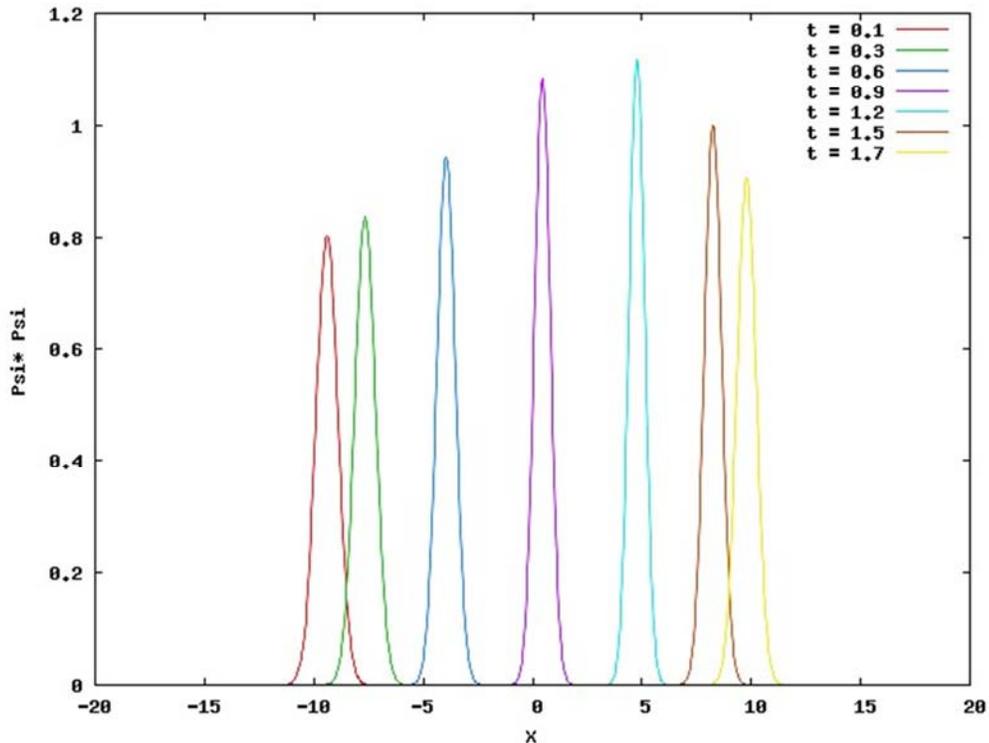


**Figura 3.18.** Valor esperado del momento  $\langle p(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano en un potencial de oscilador armónico con una velocidad inicial  $v = 5$ .

Para el paquete de ondas con una velocidad inicial de  $v = 5$ , el valor esperado de la energía total del sistema  $\langle E(t) \rangle$  se conserva, con un valor de  $\langle E(t) \rangle = 412.5$ , donde la energía cinética promedio  $\langle T \rangle = 12.5$ . Esto dado que en los puntos de retorno, el paquete de ondas cuenta con una

energía potencial promedio máxima y con energía cinética promedio nula y conforme evoluciona, a medida que su energía potencial disminuye, su energía cinética promedio aumenta en otros puntos, por lo que en su evolución temporal su energía se mantiene invariante para todo tiempo  $t$ .

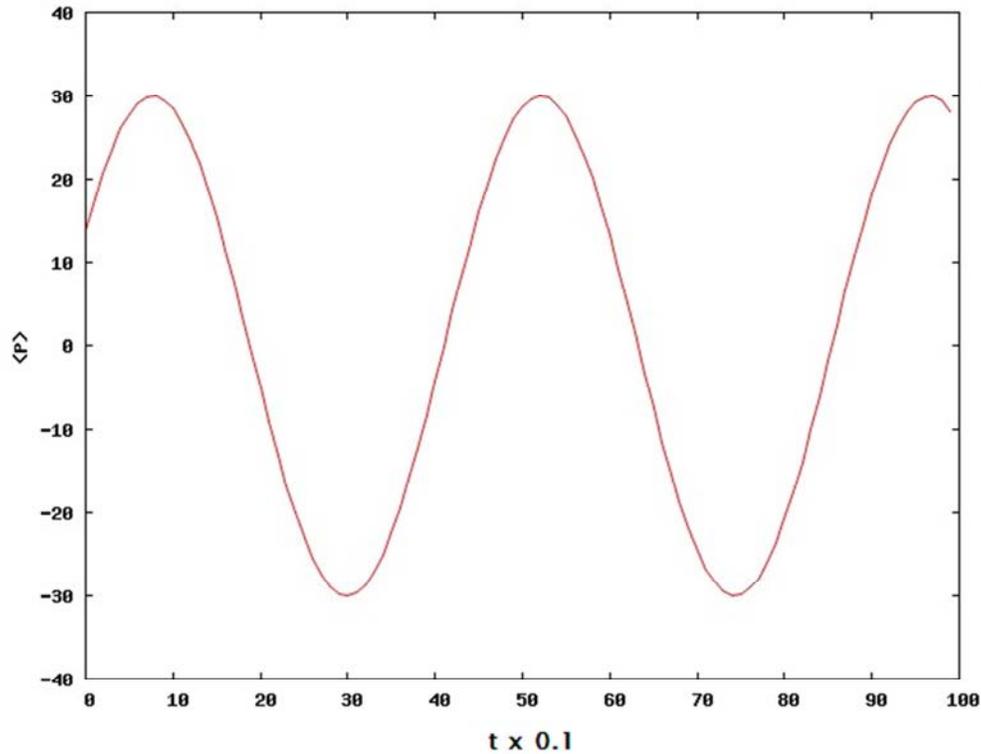
Ahora bien, en la figura 3.19, se muestra el mismo paquete de ondas sujeto a un potencial de oscilador armónico con una velocidad  $v = 10$  a un tiempo inicial  $t_0 = 0$ , todo esto en una posición inicial en  $x_0 = -10$ . Todo esto para una evolución temporal de 100,000 pasos temporales.



**Figura 3.19.** Evolución de un paquete de onda Gaussiano sujeto a un potencial de oscilador armónico. La evolución da comienzo en el punto inicial  $x_0 = -10$  a un tiempo  $t_0 = 0$  y una velocidad inicial  $v = 10$ .

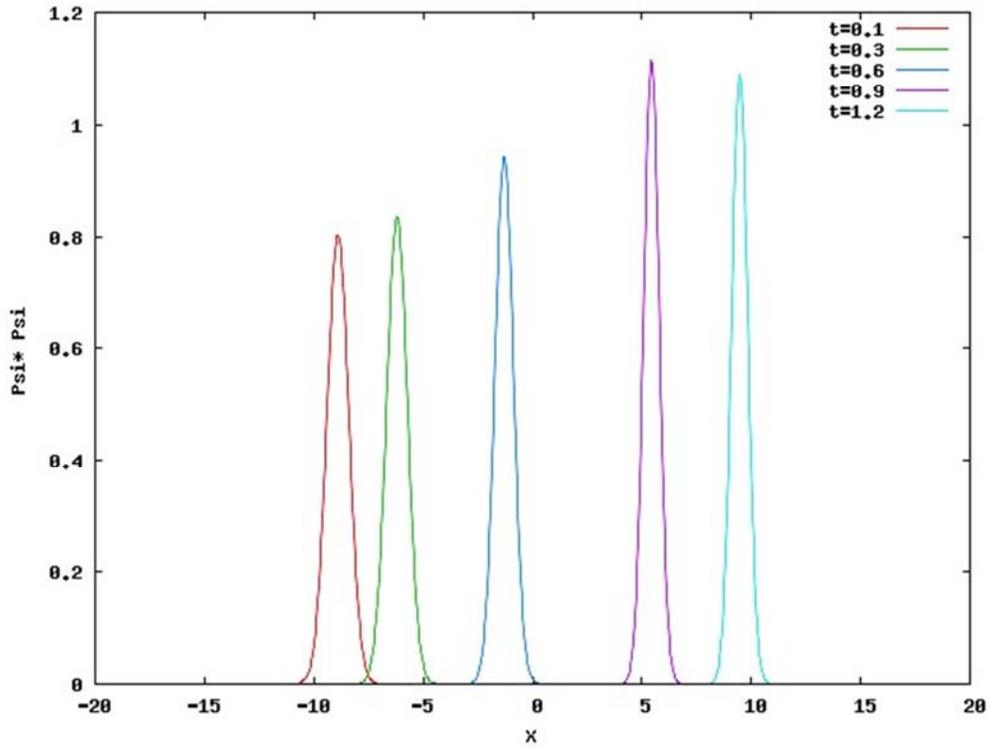
El paquete de ondas tiene sus puntos de retorno en la posición  $x = \pm 10.60$  en los tiempos  $t = 18.94 \times 10^{-4}$ ,  $t = 40.99 \times 10^{-4}$ ,  $t = 62.99 \times 10^{-4}$  y  $t = 84.99 \times 10^{-4}$ , observándose que en tales instantes su amplitud de probabilidad es mínima. En los tiempos  $t = 7.70 \times 10^{-4}$ ,  $t = 29.90 \times 10^{-4}$ ,  $t = 52.12 \times 10^{-4}$  y  $t = 96.53 \times 10^{-4}$ , el paquete de ondas se encuentra localizado en la parte de mínima energía del potencial, teniendo su máxima amplitud de probabilidad el paquete de ondas, y nuevamente el valor medio de la posición  $\langle x(t) \rangle$  es de tipo oscilatorio.

En el cálculo del valor esperado del momento lineal  $\langle p(t) \rangle$ , puede observarse que existe un comportamiento de tipo oscilatorio, tal que en los puntos de retorno, la velocidad de la partícula es nula y para los instantes en que el paquete de ondas se localiza en el mínimo del potencial su velocidad es máxima, tal como se puede apreciar en la figura 3.20 más adelante. El valor esperado de la energía total del sistema se conserva con un valor de  $\langle E(t) \rangle = 450$ .

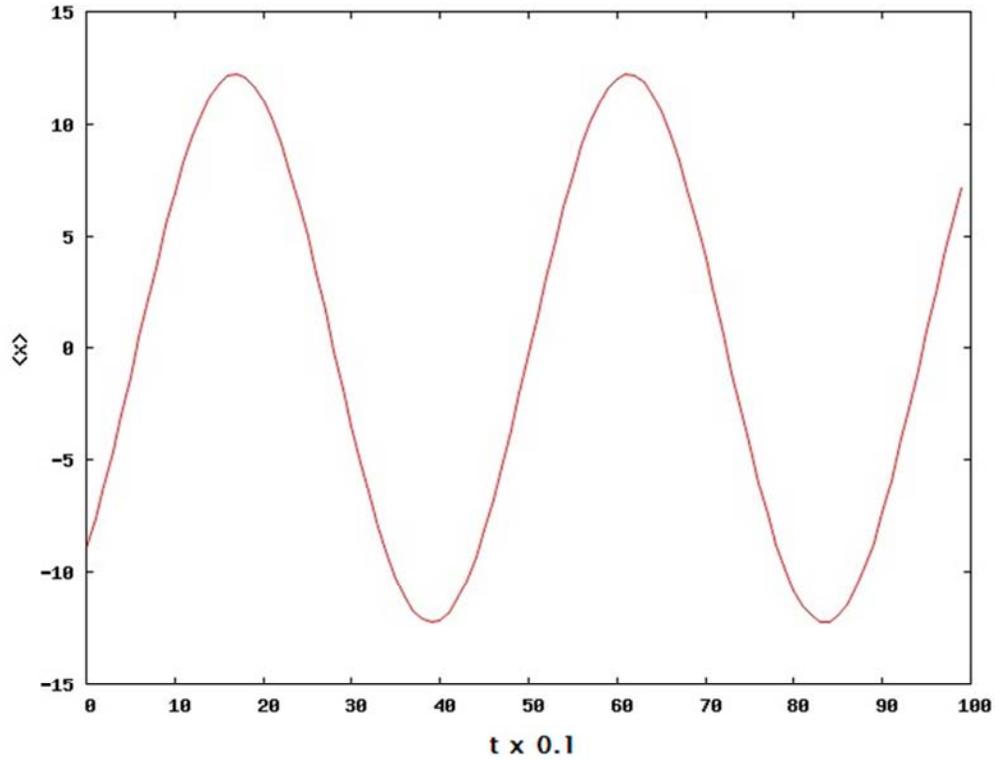


**Figura 3.20.** Valor esperado del momento  $\langle p(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano en un potencial de oscilador armónico con una velocidad inicial  $v= 10$ .

Como análisis final de esta sección, concluiremos el estudio de la evolución temporal de un paquete de ondas de tipo Gaussiano sujeto a la interacción de un potencial de oscilador armónico, siguiendo el esquema inicialmente planteado para velocidades iniciales diferentes de cero, en esta ocasión con un valor de  $v = 20$ . A continuación se muestra esta evolución para 100,000 pasos temporales, tal como inicialmente se ha venido planteado en la sección de este trabajo. Para ello se muestra dicha evolución temporal del paquete de ondas en la figura 3.21 y el valor esperado de la posición  $\langle x(t) \rangle$  en la figura 3.22.



**Figura 3.21.** Evolución de un paquete de onda Gaussiano sujeto a un potencial de oscilador armónico. La evolución da comienzo en el punto inicial  $x_0 = -10$  a un tiempo  $t_0 = 0$  y una velocidad inicial  $v = 20$ .

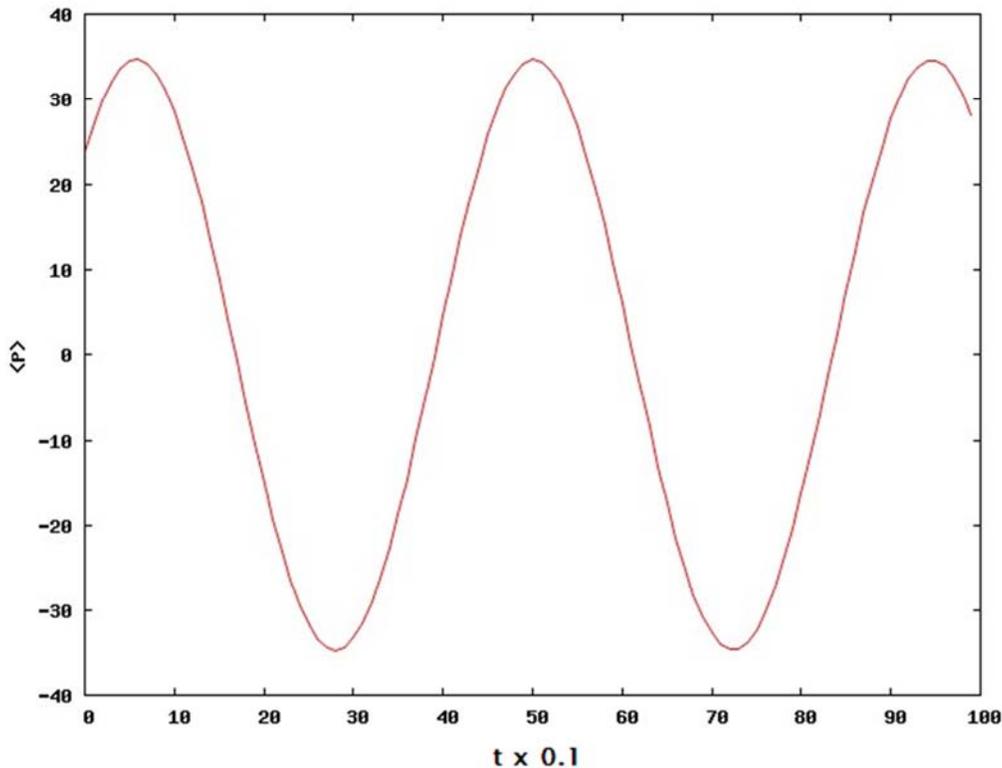


**Figura 3.22.** Valor esperado de la posición  $\langle x(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano en un potencial de oscilador armónico con una velocidad inicial  $v = 20$ .

Dadas las gráficas anteriores, se puede verificar que el paquete de ondas presenta sus puntos de retorno en  $x = \pm 12.26$  para los tiempos  $t = 17.27 \times 10^{-4}$ ,  $t = 39.45 \times 10^{-4}$ ,  $t = 61.45 \times 10^{-4}$  y  $t = 83.81 \times 10^{-4}$ , observándose que en tales instantes que su amplitud de probabilidad es mínima.

Para los tiempos  $t = 5.74 \times 10^{-4}$ ,  $t = 27.94 \times 10^{-4}$ ,  $t = 50.16 \times 10^{-4}$ ,  $t = 72.35 \times 10^{-4}$  y  $t = 94.56 \times 10^{-4}$  el paquete de ondas está ubicado en la parte de mínima energía del potencial, teniendo su máxima amplitud de probabilidad al encontrarse en esa región. Y nuevamente, la gráfica del valor medio de la posición  $\langle x(t) \rangle$  es de tipo oscilatorio, tal como se esperaba.

Por otra parte, con el cálculo del valor esperado del momento lineal  $\langle p(t) \rangle$ , se observa en los puntos de retorno mencionados anteriormente, la velocidad de la partícula es igual a cero y en los puntos donde el paquete de ondas se encuentra en la posición donde el potencial es mínimo, la velocidad de dicho paquete es máxima, tal como se puede observar en la figura 3.23.



**Figura 3.23.** Valor esperado del momento  $\langle p(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano en un potencial de oscilador armónico con una velocidad inicial  $v = 20$ .

Para el paquete de ondas con una velocidad inicial de  $v = 20$ , el valor esperado de la energía total del sistema se conserva para un valor de  $\langle E(t) \rangle = 600$ . Todo esto, dado que la energía cinética promedio  $\langle T \rangle = 200$ .

Dados los resultados anteriores, podemos corroborar que el paquete de ondas de tipo Gaussiano, el cual se ha encontrado sujeto a un potencial de oscilador armónico, exhibe un

comportamiento similar en los casos con distintas velocidades iniciales. Esto es, que tendrá su amplitud de probabilidad menor en los puntos de retorno del potencial, exhibiendo una velocidad nula. Por el contrario, en el punto mínimo del potencial, específicamente cuando  $V(x) = 0$ , la amplitud de probabilidad del paquete de ondas será máxima y poseerá el máximo de velocidad.

En esta evolución temporal se corroboró que la energía total del sistema se conserva para todo tiempo  $t$ . Además se pudo apreciar que cuando la energía cinética promedio  $\langle T \rangle$  es máxima, la energía potencial es nula y viceversa. El incremento de la velocidad ocasiona que los puntos de retorno se sitúen en puntos más alejados del mínimo del potencial comparados con la velocidad del paquete cuando esta no es nula inicialmente. Además, alcanzará el paquete de ondas distancias mayores en tiempos menores a medida que su velocidad se incremente. Al tiempo que los valores esperados de la posición y el momento lineal, muestran comportamientos oscilatorios.

Ya probado que el método numérico de este trabajo funciona para este tipo de potenciales, los cuales a pesar de su sencillez, son bastante significativos en la mecánica cuántica. En estos momentos, es conveniente proceder al estudio de potenciales de tipo periódico y localizados, los cuales representan aplicaciones de diversa índole en la física contemporánea y es el objetivo central de este trabajo, lo cual realizaremos en el siguiente capítulo.

## **CAPÍTULO IV. EVOLUCIÓN TEMPORAL DE UN PAQUETE DE ONDAS SUJETO A LA ACCIÓN DE UN POTENCIAL PERIÓDICO LOCALIZADO.**

En el capítulo anterior, se llevó a cabo el estudio de la evolución temporal de un paquete de ondas considerando diferentes velocidades iniciales  $v_0$ . Además, dicho paquete de ondas estuvo sujeto a dos tipos de potenciales: de partícula libre y de oscilador armónico. Lo anterior fue de ayuda fundamental para comprobar que efectivamente el método planteado en este trabajo funciona adecuadamente para los casos más estudiados en la literatura, por lo que en este capítulo vamos a emplearlo en el estudio de la evolución considerando potenciales periódicos localizados. Nos referimos como potencial periódico localizado a uno que se repite con regularidad en uno o más intervalos en el espacio. Esta situación física es interesante ya que, por ejemplo en mecánica cuántica la forma más sencilla para representar un electrón en un cristal, es considerándolo en un potencial de barrera múltiple, lo cual representa un potencial periódico.

Para este trabajo se considera la interacción de un paquete de ondas de tipo Gaussiano que cuenta con una velocidad inicial  $v_0$ , el cual se propagará primeramente en un potencial de partícula libre, luego estará sujeto a un potencial senoide de extensión finita y finalmente, de nuevo se encontrará su evolución sujeta a un potencial de partícula libre.

### **4.1 Descripción del Potencial Sinusoide considerado.**

En este capítulo, se hace un estudio de la evolución de un paquete de ondas que esté confinado en un mínimo del potencial senoide desde una velocidad nula, hasta una velocidad diferente de cero, ya sea hacia la izquierda o hacia la derecha. Lo anterior se hace con el fin de estudiar la existencia de fenómenos de tunelamiento y atrapamiento de tal paquete de ondas ya estudiado, en un potencial de tipo senoide. Entendiendo como atrapamiento o confinamiento cuántico al fenómeno cuando los electrones en un material se encuentran restringidos a moverse en una región muy pequeña del espacio se dice que están confinados [22].

Adoptar el concepto del fenómeno de tunelamiento para nuestro trabajo es entender el proceso mecánico cuántico a través del cual una partícula (pulso de tipo Gaussiano para nuestro caso) sea capaz de penetrar una región del espacio prohibida clásicamente, la cual es establecida por un potencial determinado (senoide). Este tipo de fenómeno de tunelamiento ha sido estudiado desde 1927, por F. Hund [23], el cual fue el primero en notar la posibilidad del fenómeno de tunelamiento, al cual llamo “penetración de barrera”, en un cálculo del desdoblamiento del estado base en un potencial de doble pozo. Posteriormente George Gamow [24] y de manera independiente, R. W. Gurney y E. U. Condon [25] aplicaron el fenómeno de tunelamiento para explicar el rango de la tasa de decaimiento alfa de un núcleo radiactivo.

Por otra parte, en 1967 Goldberg, Schey y Schartz [26] crearon uno de las primeras imágenes generadas por computadora de la dispersión de un paquete de ondas de tipo Gaussiano

impactando en una barrera o pozo de potencial, donde parte de dicho paquete fue reflejado y otra parte transmitido. De tal manera que fue posible estudiar los fenómenos de reflexión y transmisión y resolver la ecuación de onda por métodos numéricos concentrándose en fotografías de la amplitud de probabilidad del paquete de ondas contra la posición en una variedad de tiempos. En el caso de potenciales barreras se encuentra que al ocurrir los fenómenos de reflexión y transmisión, hay una probabilidad finita de que una partícula sea atrapada dentro de la barrera por un tiempo determinado. Sin embargo en el trabajo de Goldberg et.al. no se presenta en detalle la descripción en términos de trayectorias individuales. Dado lo anterior, Dewdney and Hiley [27], se dedican a reproducir este tipo de fenómenos de forma computacional y calcular sus evoluciones temporales con trayectorias asociadas de un ensemble de condiciones iniciales para un paquete de ondas de tipo Gaussiano.

Estos fenómenos de atrapamiento representan temas importantes de actualidad, dado que se estudian los efectos de atrapamiento y enfriamiento de partículas, específicamente en átomos, y son de gran interés dado su aplicación en campos tales como óptica atómica, espectroscopia de precisión, comunicación óptica y en el desarrollo del campo de la computación cuántica [28].

Por lo anteriormente expuesto, en lo que se sigue realizaremos un análisis de los fenómenos de tunelamiento y atrapamiento de un paquete de ondas de tipo Gaussiano, mediante el cálculo de la evolución temporal de observables como la posición  $\langle x(t) \rangle$ , el momento lineal  $\langle p(t) \rangle$  y corroborar que el valor esperado de la energía del sistema  $\langle E(t) \rangle$  se conserva, tal como se ha venido haciendo hasta el momento.

Para llevar a cabo lo anterior construiremos un potencial similar al mostrado en la figura b de la introducción, de tal manera que pueda ser vista la evolución temporal de una partícula que esté sujeta bajo a la acción de este tipo de potencial de onda de luz estacionaria. Cabe aclarar que la representación de la partícula empleada fue un paquete de ondas de tipo Gaussiano.

El potencial periódico unidimensional es de la forma:

$$V(x) = \begin{cases} A \left[ 1 - \cos\left(\frac{2\pi x}{d} - \phi\right) \right], & \text{si } |x| \leq L/2 \\ 0 & \text{si } |x| > L/2 \end{cases} \quad (4.1)$$

donde  $A$  es la amplitud del potencial sinusoidal,  $d$  es la longitud de onda de la onda estacionaria,  $\phi$  corresponde a su fase y  $L$  es la longitud finita del potencial. Este potencial se muestra esquemáticamente en la figura 4.1.

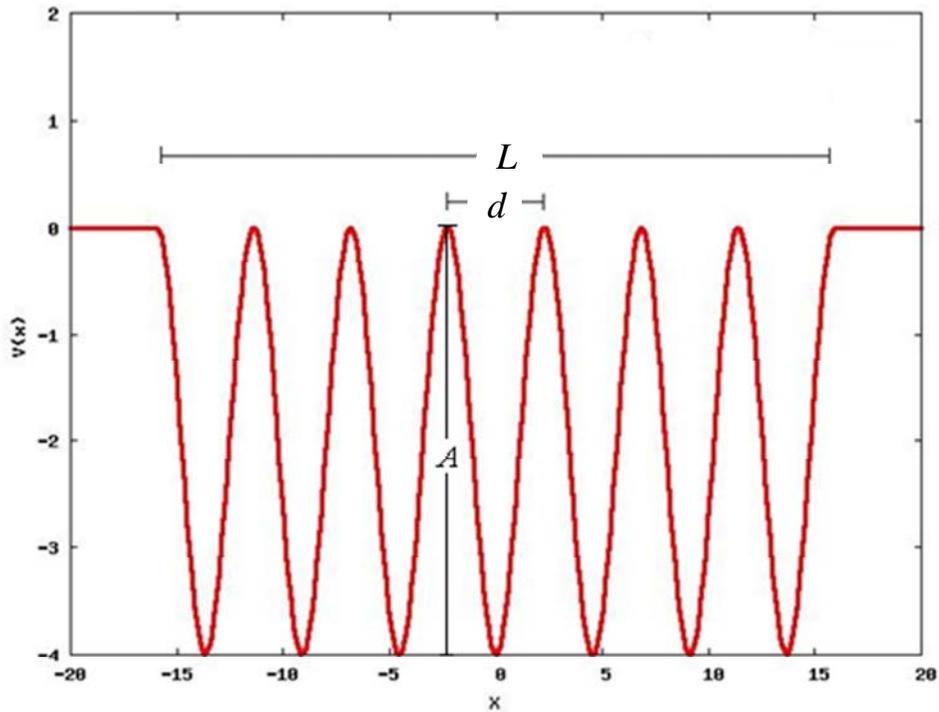


Figura 4.1. Potencial sinusoide descrito por los parámetros  $A = -2$ ,  $L=32$ ,  $d = 1.45 \pi$  y  $\varphi = \pi$ .

Como se había mencionado al inicio de este trabajo, la idea de escoger este potencial surge del análisis del artículo de los autores Horne, M. y Zeilinger, A. [7] los cuales plantean inicialmente encontrar funciones de onda de la ecuación de Schrödinger generadas en un medio con un potencial de tipo sinusoide fuerte unidimensional. Donde dicho potencial de longitud infinita, originalmente es de la forma:

$$V(x) = V_0 + 2V_1 \cos Gx \quad (4.2)$$

con:

$$V_0 = 2V_1,$$

$$G = 2\pi / d$$

donde  $d$  representa la distancia entre los picos del potencial sinusoide.

Haciendo un comparativo entre los potenciales mencionados arriba, la amplitud  $A$  de la expresión (4.1) es igual a  $V$  con respecto a la expresión (4.2). Además  $d$  es la longitud de onda del potencial en la constante  $G$  en (4.2). Cabe aclarar que en nuestro potencial agregamos una fase  $\phi = \pi$  con el fin de centrar uno de los mínimos de nuestro potencial sinusoidal en  $x = 0$ .

Al tener especificado el potencial sinusoidal en cada uno de sus parámetros, procedemos a encontrar la solución numérica de la función de onda de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo unidimensional:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} - A[1 - \text{Cos}(kx - \phi)]\psi(x,t) = 0 \quad (4.3)$$

La propagación del paquete de ondas será de manera unidimensional a lo largo del eje  $x$ . La expresión (4.3), efectivamente, representa a la ecuación de Schrödinger como una ecuación diferencial parcial de segundo orden con un coeficiente no lineal y dependiente de  $x$ .

Dado que la solución analítica de esta expresión presenta un cierto grado de dificultad obtenerla, es conveniente emplear otras formas alternativas de resolverla. Es por ello que se plantea la solución de dicha ecuación, por medio del método numérico descrito en este trabajo, cuyos resultados se presentaran en la siguiente sección de este capítulo.

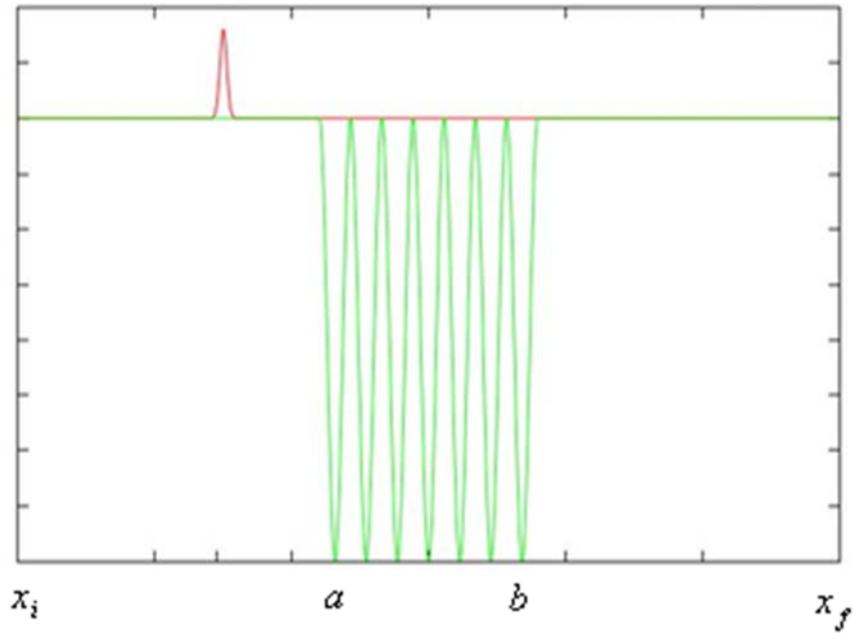
## 4.2 Evolución temporal de un paquete de ondas Gaussiano sujeto a un potencial sinusoidal.

Siguiendo el esquema anterior, presentamos el caso de un potencial de tipo sinusoidal de la forma:

$$V(x) = -2[1 - \text{Cos}(kx - \pi)]$$

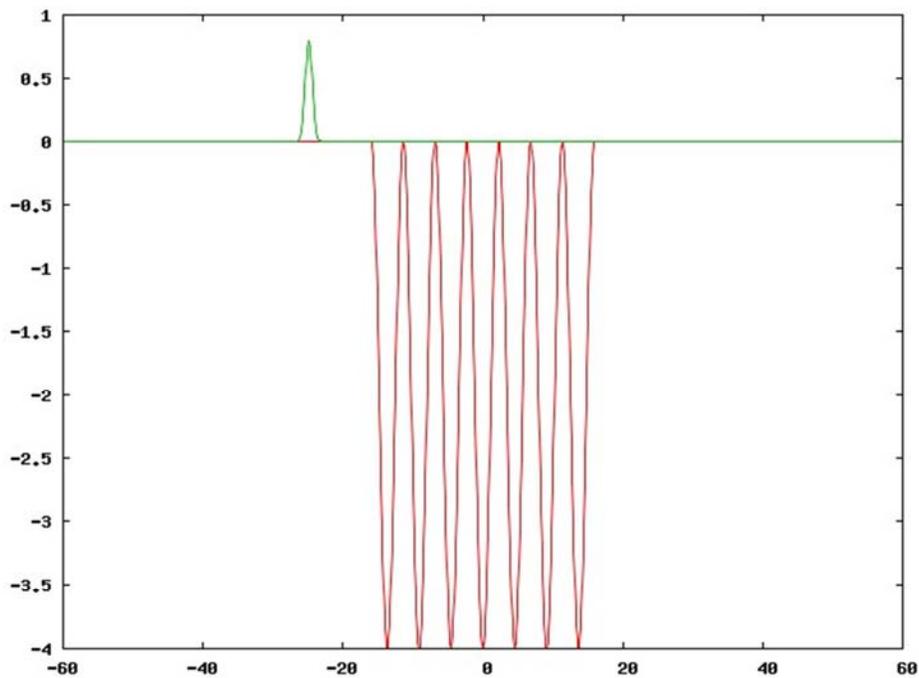
Para tal potencial consideramos  $k = 1.3793$ , un ángulo de fase  $\phi = \pi$  y  $d = 1.45\pi$ , válido para valores  $|x| \leq 16$  y es nulo para  $|x| > 16$ .

El potencial está centrado en  $x = 0$  y se extiende desde un punto  $a = -16$  hasta un punto  $b = 16$ . La parte espacial donde el paquete de ondas se puede propagar es desde un punto inicial  $x_i$  hasta un punto final de  $x_f$ , que variaron para los diferentes casos analizados, como se muestra en la siguiente figura:



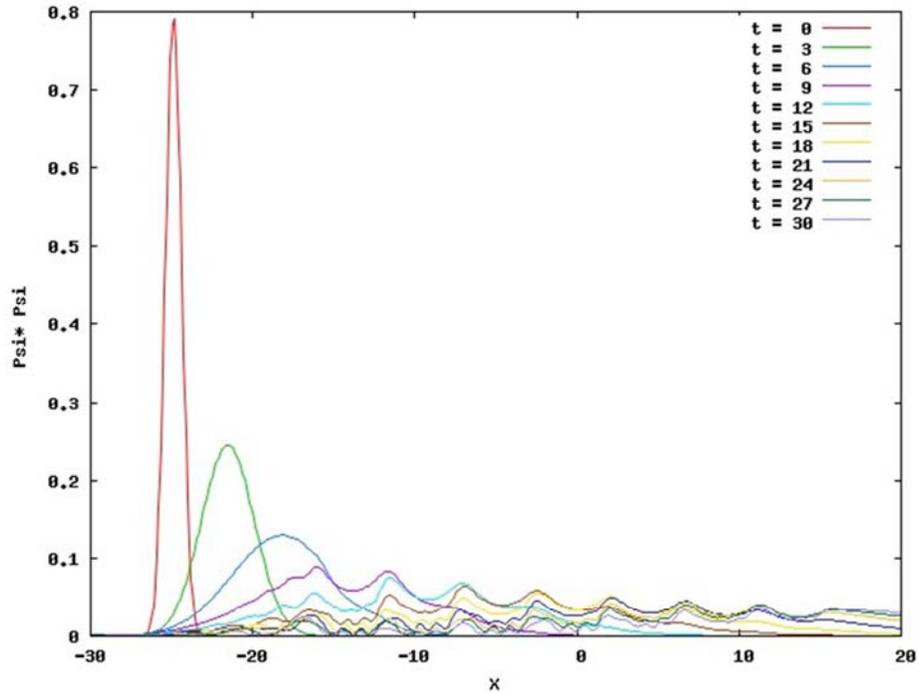
**Figura 4.2.** Potencial sinusoide y paquete de ondas inicial.

Por otra parte, se coloca al paquete de ondas en una posición inicial de  $x_0 = -25$ , a un tiempo  $t_0 = 0$  dentro de la malla espacial, con el fin de hacerlo evolucionar con una velocidad  $v = 2.23$ , tal como se muestra a continuación:



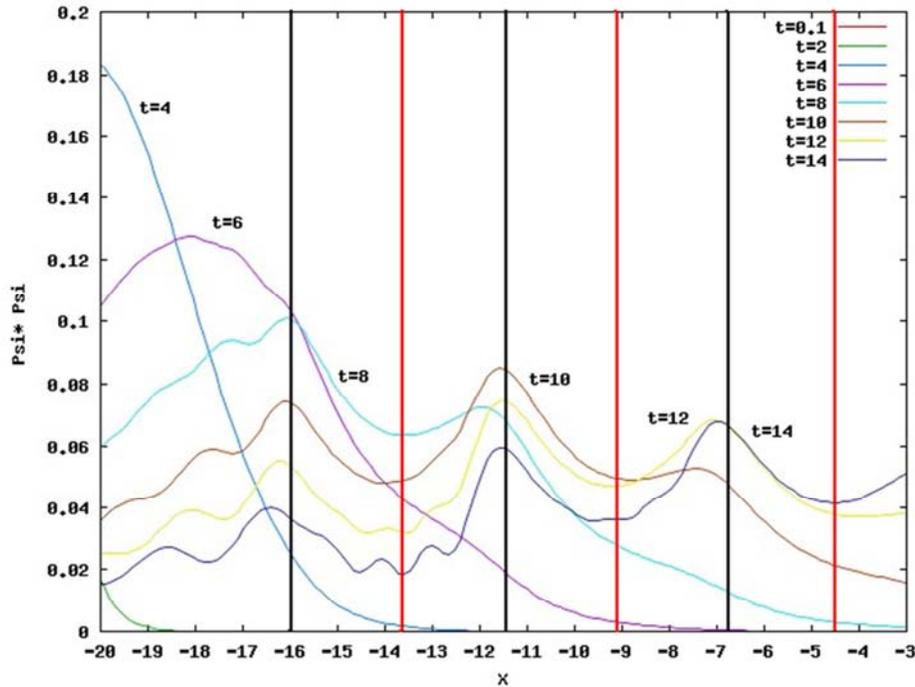
**Figura 4.3.** Paquete de ondas en su posición inicial  $x_0 = -25$  y con una velocidad inicial  $v = 2.23$ , ante un potencial sinusoides para su evolución temporal.

Se hicieron un total de 300,000 evoluciones temporales del paquete de onda, todo esto en una malla temporal de tamaño  $\Delta t = 0.0001$ . La siguiente figura muestra algunos diferentes pasos temporales para valores de  $t = 0$  hasta  $t = 30$ .



**Figura 4.4.** Evolución de un paquete de ondas en un potencial sinusoide con una velocidad inicial  $v = 2.23$ .

Para verificar el comportamiento de una manera más óptima con esta evolución temporal del paquete de ondas en el potencial sinusoide, es preciso hacer una ampliación en la región de estudio abordada arriba, la cual se muestra en la figura siguiente.



**Figura 4.5.** Evolución de un paquete de ondas en un potencial sinusoidal con una velocidad inicial  $v = 2.23$ .  
 Las líneas verticales oscuras indican el inicio y los máximos del potencial.  
 Las líneas verticales rojas representan la ubicación del mínimo del potencial.

Como se puede apreciar en dicha figura, donde el potencial está acotado en el rango  $[-7\lambda/2 \approx 15.94, -\lambda \approx -4.55]$ , la amplitud de probabilidad  $|\psi|^2$  presenta máximos en  $x = -7\lambda/2 \approx 15.94$ ,  $x = -5\lambda/2 \approx -11.38$ ,  $x = -3\lambda/2 \approx -6.83$  y  $x = \lambda/2 \approx 2.27$ , mientras que los valores mínimos se ubican en  $x = -3\lambda \approx -13.66$ ,  $x = -2\lambda \approx -9.11$  y  $x = -\lambda \approx -4.55$ .

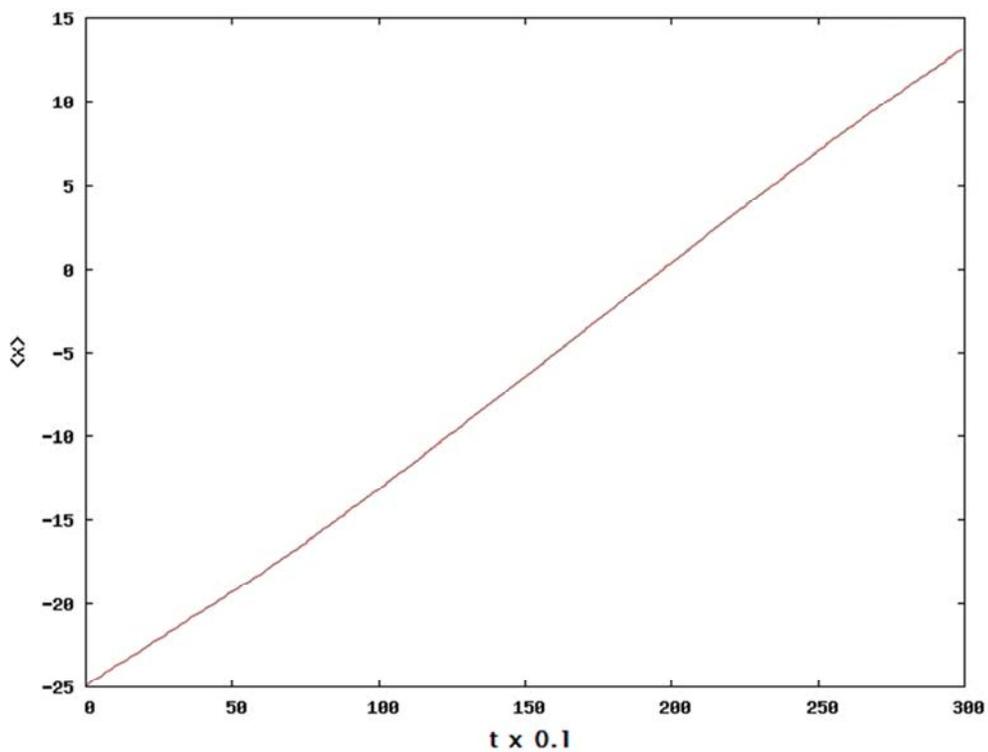
En la figura 4.5 se puede observar que el paquete de ondas de tipo Gaussiano empieza a introducirse en el potencial sinusoidal en la parte que conduce al primer mínimo, todo esto para  $t = 4$ . Para el tiempo  $t = 6$  el paquete de ondas empieza a sufrir una deformación, sin embargo, su amplitud de probabilidad más alta se encuentra fuera del potencial sinusoidal, significando que aún no ha penetrado al potencial. Para un tiempo  $t = 8$ , la máxima amplitud de probabilidad se encuentra aún en el borde inicial del potencial sinusoidal, de tal manera que es posible afirmar que el paquete de ondas está empezando a introducirse al potencial. Conforme el paquete de ondas evoluciona para los tiempos  $t = 10$ ,  $t = 12$  y  $t = 14$  se observa que el paquete de ondas sufre un retroceso, el cual puede verificarse espacialmente en  $x = -7\lambda/2 \approx 15.94$ , justo en el inicio del potencial sinusoidal, dado que su amplitud máxima “retrocede”, por lo que podemos afirmar que existe en esa región un fenómeno de reflexión.

Para la región comprendida en el intervalo de  $-7\lambda/2 \approx 15.94$  a  $-5\lambda/2 \approx -11.38$  se observa que para los tiempos  $t = 4$ ,  $t = 6$  y  $t = 8$ , no ha alcanzado a avanzar al mínimo del potencial dado que su amplitud máxima de probabilidad está ubicada en un inicio posterior de la entrada al potencial sinusoidal. Sin embargo para los tiempos posteriores de  $t = 10$ ,  $t = 12$  y  $t = 14$ , se observa una clara tendencia a que el paquete de ondas ha logrado penetrar, dado que la máxima amplitud de su

probabilidad se encuentra exactamente en  $x = -5\lambda/2 \approx -11.38$ , justo donde el potencial sinusoidal tiene su primer máximo.

Por otra parte, para la región comprendida en el intervalo  $-5\lambda/2 \approx -11.38$  a  $-3\lambda/2 \approx -6.83$ , donde ambos extremos representan el primer máximo y segundo máximo del potencial sinusoidal respectivamente, se encuentra una tendencia muy marcada a que la partícula está dentro del segundo mínimo y avanzando hacia la siguiente barrera de tipo sinusoidal, tal como lo muestran los tiempos  $t = 8$ ,  $t = 10$ ,  $t = 12$  y  $t = 14$  donde su amplitud máxima de probabilidad está centrada en el segundo mínimo. Finalmente en su evolución puede observarse que seguirá penetrando estas barreras de energía, sin embargo, la probabilidad de que esto ocurra decrecerá dado que la velocidad inicial con la que se ha conducido el paquete de ondas será frenada por las barreras de energía de los máximos del potencial.

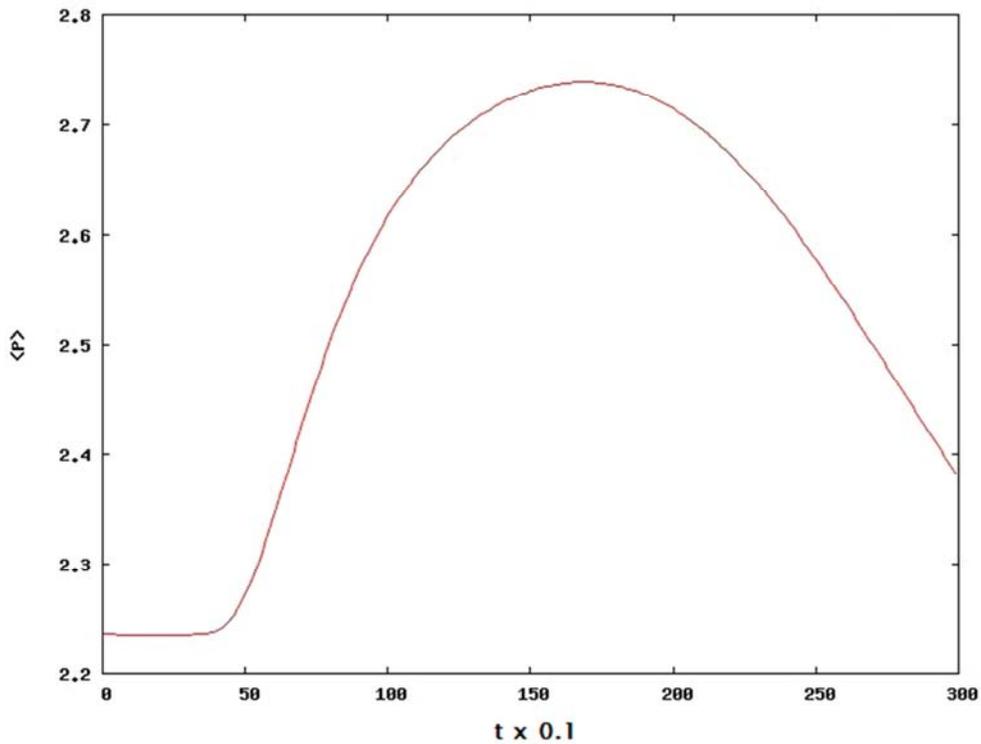
Ya identificadas las regiones de estudio y el comportamiento mostrado por el paquete de ondas en el potencial presentado, se procederá a estudiar las observables de  $\langle x(t) \rangle$  y  $\langle p(t) \rangle$ , tal como se muestran en las siguientes figuras.



**Figura 4.6.** Valor esperado de la posición  $\langle x(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano en un potencial sinusoidal con una velocidad inicial  $v = 2.23$ .

En la figura 4.6 se muestra como el valor esperado del paquete de ondas se desplaza desde el punto inicial  $x_0 = -25$  hasta una posición final de  $x_f = 13.07$ , en un tiempo  $t = 30$ . Su evolución se puede considerar aproximadamente lineal. No es exactamente lineal, dado que el paquete de ondas al evolucionar en el potencial sinusoidal, este es “acelerado” y “frenado” en su velocidad por

los mínimos y máximos que presenta tal potencial, tal como se mostrara más adelante con el cálculo del valor esperado del momento lineal.



**Figura 4.7** Valor esperado del momento lineal  $\langle p(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano en un potencial senoide con una velocidad inicial  $v = 2.23$ .

Para la misma situación, el valor esperado del momento lineal (figura 4.7) del paquete de onda se incrementa, al pasar de una velocidad inicial  $v = 2.23$  en un tiempo inicial  $t_0 = 0$ , hasta alcanzar su máxima velocidad de  $v = 2.75$  para un tiempo  $t = 18$ , de tal manera que a partir de este punto disminuye su velocidad drásticamente. Esto se debe a que los mínimos del potencial hacen que el paquete de ondas incremente su velocidad, tal como si fuera un potencial de oscilador armónico, mientras que los máximos hacen que disminuya su energía cinética.

Finalmente, para el caso del valor esperado de la energía, se tiene una cantidad de  $\langle E(t) \rangle = 3.00456$ , la cual se conserva para todo tiempo  $t$ .

Continuando con el estudio de la evolución temporal del paquete de ondas en un potencial senoide, el número de pasos temporales realizados fueron de 300,000. Para este estudio se emplearon los parámetros del caso anterior, variando únicamente la velocidad inicial, a un valor de  $v = 3.1622$ . En la siguiente figura se muestran dichas evoluciones temporales.

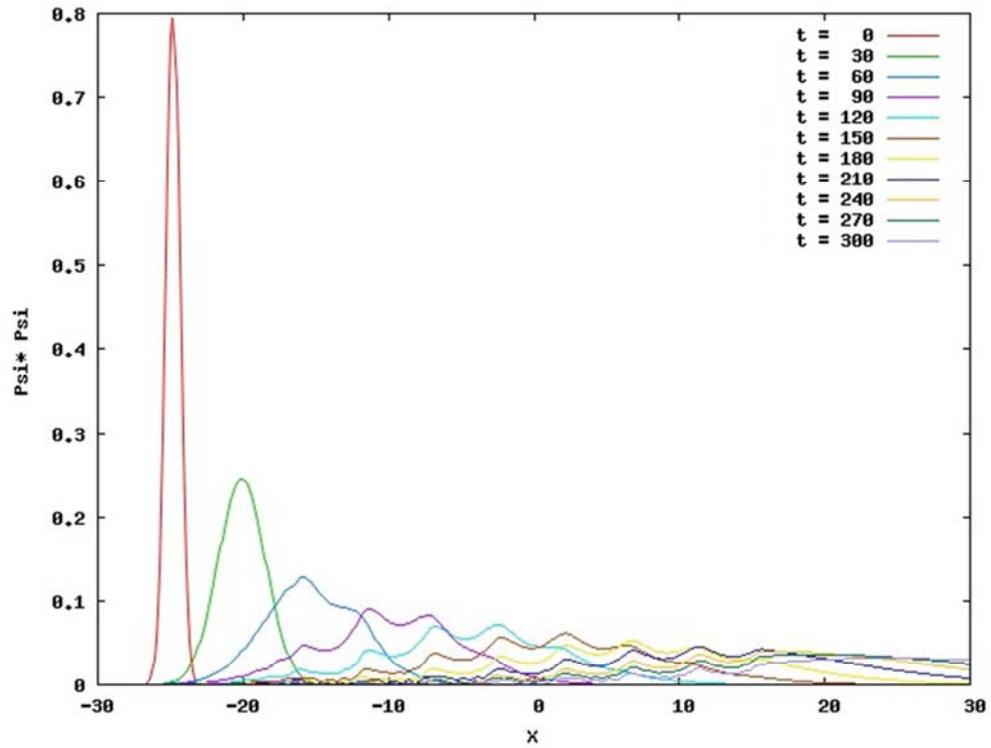


Figura 4.8. Evolución de un paquete de ondas en un potencial sinusoide con una velocidad inicial  $v = 3.1622$ .

De igual forma que en el caso anterior, haciendo una ampliación en la región de estudio:

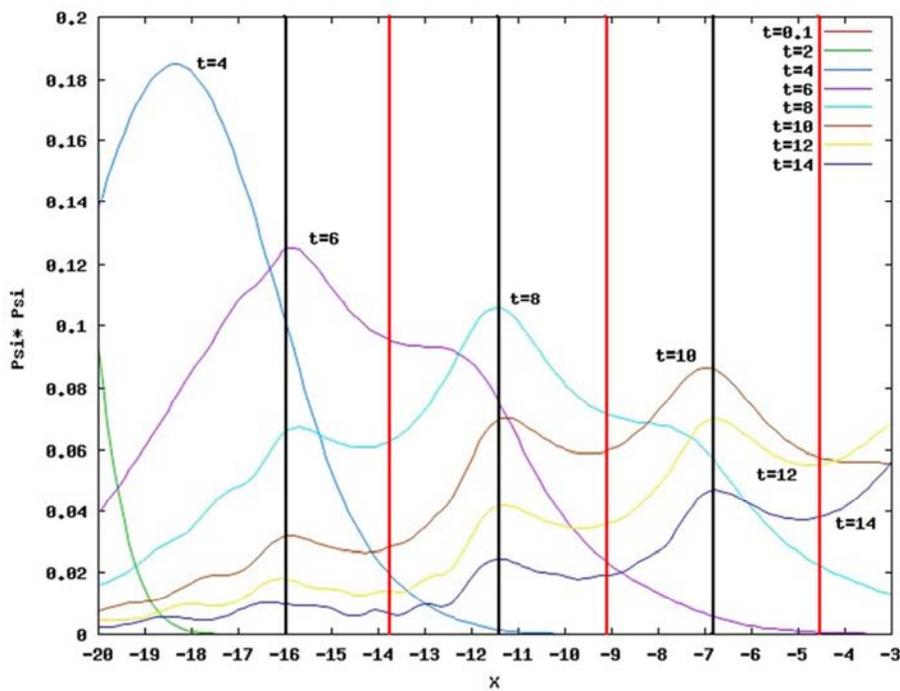


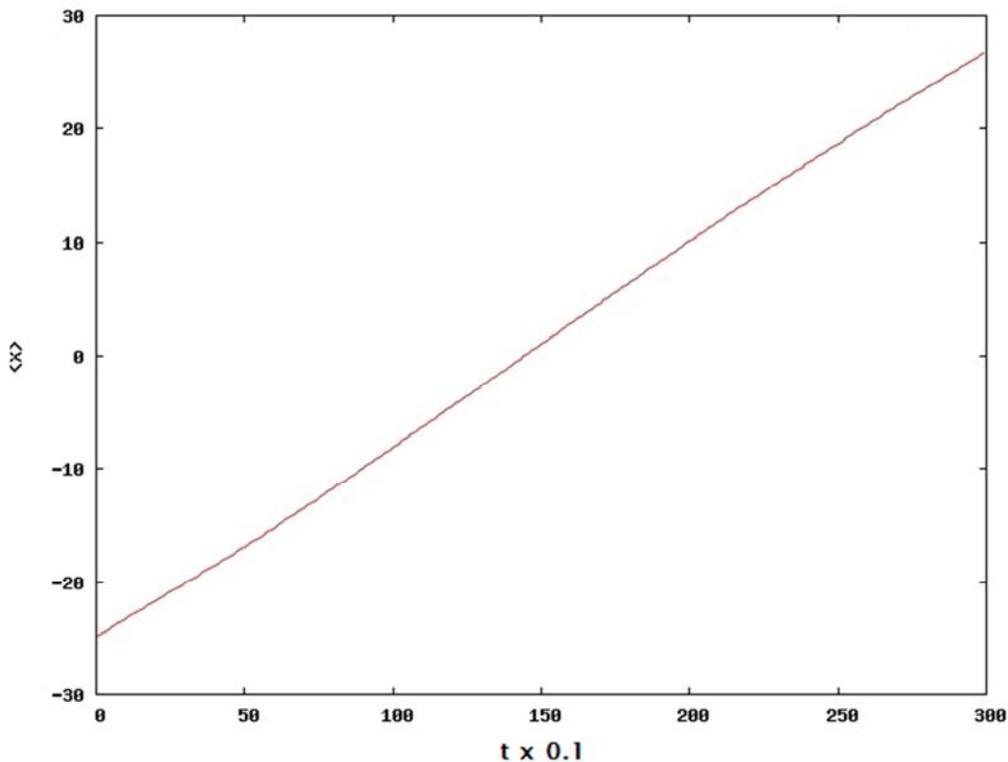
Figura 4.9. Evolución de un paquete de ondas en un potencial sinusoide con una velocidad inicial  $v = 3.1622$ .

Las líneas verticales oscuras indican el inicio y los máximos del potencial.

Las líneas verticales rojas representan la ubicación del mínimo del potencial.

Se puede observar en la figura anterior (4.9) que el paquete de ondas inicia su introducción en el primer pozo del potencial sinusoide en  $t = 4$ , teniendo como amplitud de probabilidad más alta en  $x = -4.13\lambda \approx -18.81$ , por lo que se puede afirmar que aún no ha penetrado totalmente al potencial. Para el tiempo  $t = 6$  la amplitud de probabilidad máxima del paquete de ondas se encuentra situado en  $x = -3.5\lambda \approx -15.94$ , lo cual indica que se ha introducido en el potencial sinusoide. Para el tiempo  $t = 8$  la amplitud de probabilidad del paquete de ondas se encuentra en el primer máximo del potencial, por lo que ahí empieza el primer intento de cruzar la barrera inicial del potencial sinusoide. Para los tiempos  $t = 10$ ,  $t = 12$  y  $t = 14$  se observa que la partícula ha sufrido un retroceso en su evolución, dado que su amplitud máxima empieza a recorrerse ligeramente hacia la izquierda del primer máximo del potencial, pudiendo deducir que en esta zona existe atrapamiento local. Continuando con este análisis, la probabilidad de alcanzar el segundo máximo es en un tiempo  $t = 10$ , que es ahí donde inicia la penetración de la segunda barrera del potencial sinusoide. Para los tiempos  $t = 12$  y  $t = 14$  es más factible que haya penetrado completamente el segundo máximo para pasar al segundo mínimo y posteriormente alcanzar el tercer máximo al tiempo  $t = 12$  y  $t = 14$ . Con esto se puede observar que a medida que el tiempo transcurre, esta irá alcanzado mayor cantidad de máximos en el potencial.

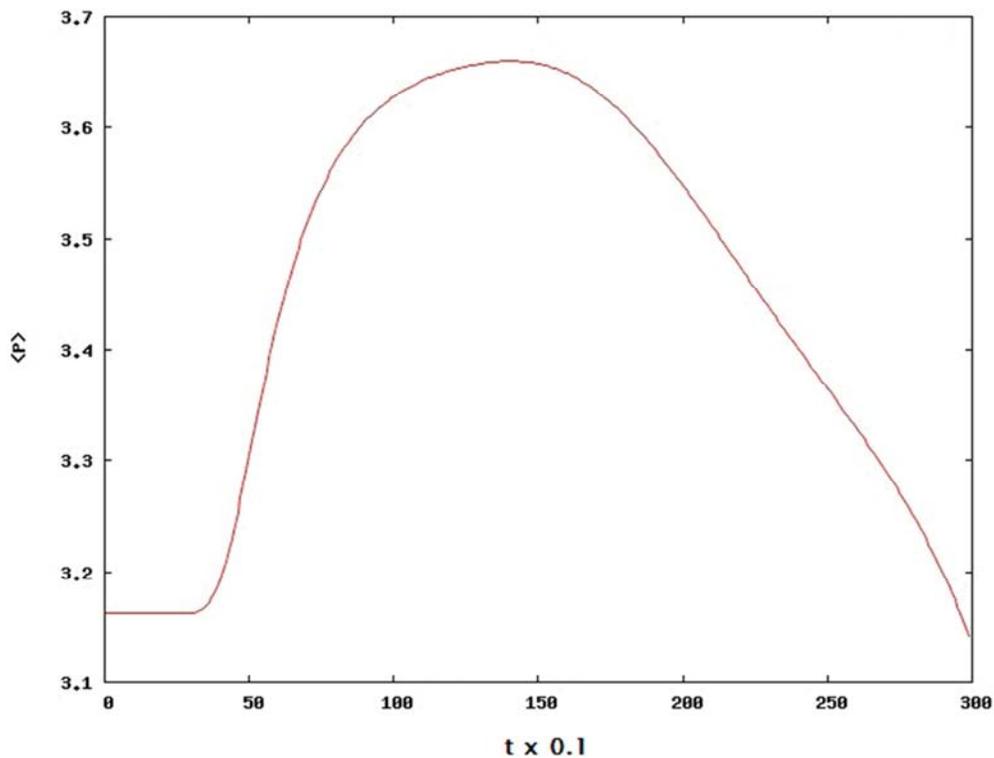
De manera análoga que el caso anterior, en su evolución puede observarse que el paquete de ondas seguirá penetrando estas barreras de energía, sin embargo, la probabilidad de que esto ocurra decrecerá dado que la velocidad inicial con la que se ha conducido el paquete de ondas será frenada por las barreras de energía de los máximos del potencial. Por otra parte, las observables de  $\langle x(t) \rangle$  y  $\langle p(t) \rangle$ , calculadas, se muestran a continuación, en las siguientes figuras:



**Figura 4.10.** Valor esperado de la posición  $\langle x(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano en un potencial sinusoide con una velocidad inicial  $v = 3.1622$ .

Se observa un comportamiento casi lineal en la evolución temporal de la partícula hacia la derecha del potencial desde un punto inicial  $x_0 = -25$  hasta una posición final de  $x_f = 26.62$ , en un tiempo  $t = 300,000 \Delta t$ .

Similarmente al caso anterior, tenemos que el valor esperado del momento lineal del paquete de onda se comporta de manera irregular dado que al impactar contra el potencial de tipo senoide existe el fenómeno de que unas ondas se reflejan y otras se transmiten, por lo que su velocidad varía y hace que el valor esperado de  $p$  cambie.



**Figura 4.11.** Valor esperado del momento lineal  $\langle p(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano en un potencial senoide con una velocidad inicial  $v = 3.1622$ .

El valor esperado de la energía, se tiene una cantidad de  $\langle E(t) \rangle = 5.4971$  se conserva para todo tiempo  $t$ .

En estos ejemplos se pudo observar cómo el paquete de ondas muestra una evolución temporal marcada hacia el eje  $x$  positivo, tal como lo muestra el valor esperado de  $\langle x(t) \rangle$ . El valor esperado del momento lineal  $\langle p(t) \rangle$  muestra cómo la velocidad del paquete de ondas se va incrementando conforme penetra el primer mínimo, alcanzando su máxima velocidad en él y va decreciendo conforme se encuentra con el primer máximo, de tal forma que su velocidad disminuye al momento de llevar a cabo el tunelamiento.

### 4.3 Evolución temporal de un paquete de ondas Gaussiano con una energía inicial de $E_0 = 0$ , contenido en un mínimo de un potencial sinusoidal.

En este apartado, se estudia la evolución temporal de un paquete de ondas de tipo Gaussiano, como se ha hecho en casos anteriores de este capítulo y el anterior. En esta ocasión, se “coloca” al paquete de ondas justamente en un mínimo de potencial centrado justamente en una posición inicial de  $x_0 = 0$ , de tal forma que se analizan los casos para velocidades iniciales de  $v = 0$  y diferentes de cero para varios valores de potencial, tal como se muestra a continuación en las diferentes figuras, y como se había planteado inicialmente, con el fin de estudiar si existen fenómenos de atrapamiento local y tunelamiento. Los parámetros utilizados para llevar a cabo esta simulación son los mismos planteados inicialmente en la sección 4.2.

Iniciamos el estudio de la evolución de un paquete de ondas de tipo Gaussiano centrado en  $x_0 = 0$ , donde en un valor de potencial  $V(x) = 0.1[1 + \cos(kx - \pi)]$ , el cual describe una amplitud máxima de  $V_{\max} = 0.2$ .

En esta primera simulación se describe la evolución temporal del paquete de ondas de tipo Gaussiano inicia su evolución en  $x_0 = 0$ , el cual es un mínimo del potencial descrito en el párrafo anterior. Este paquete de ondas tiene una energía inicial  $E_0 = 0$ . Su evolución temporal es de un valor de tiempo inicial  $t_0 = 0$  a un tiempo final de  $t_f = 26.9$ , tal como se puede apreciar en la figura 4.12.

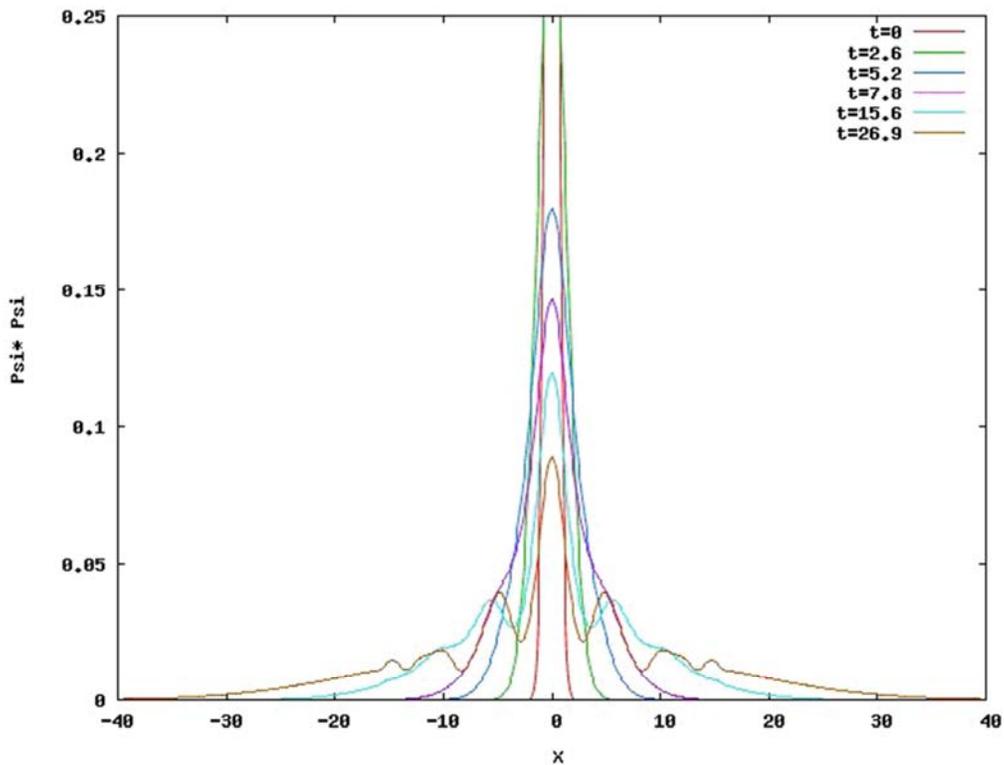
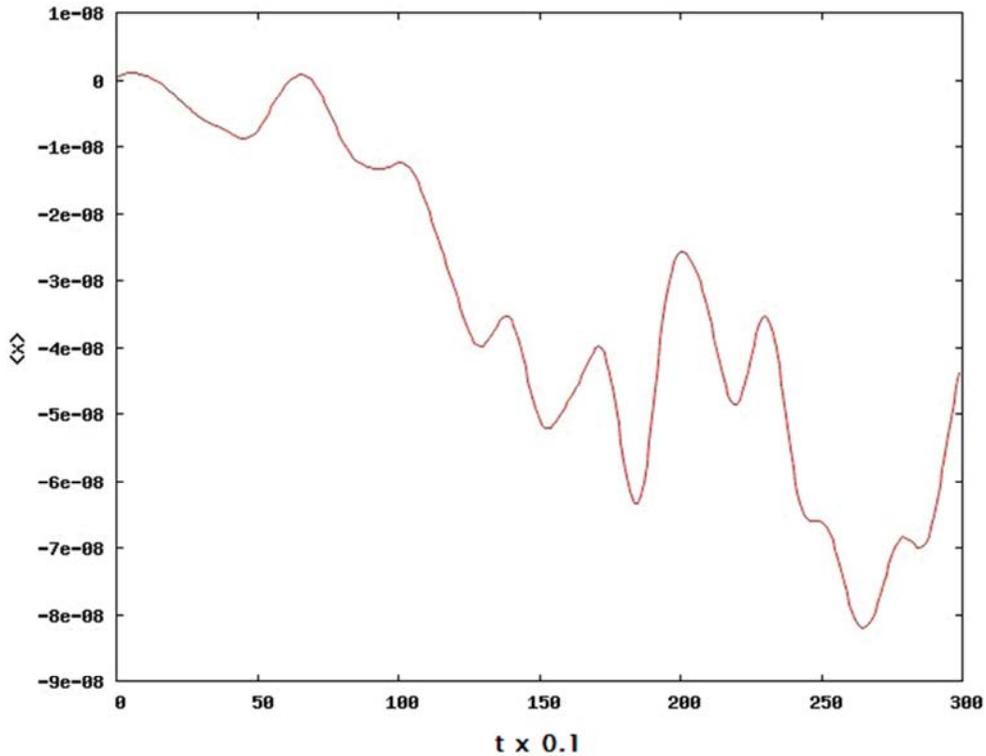


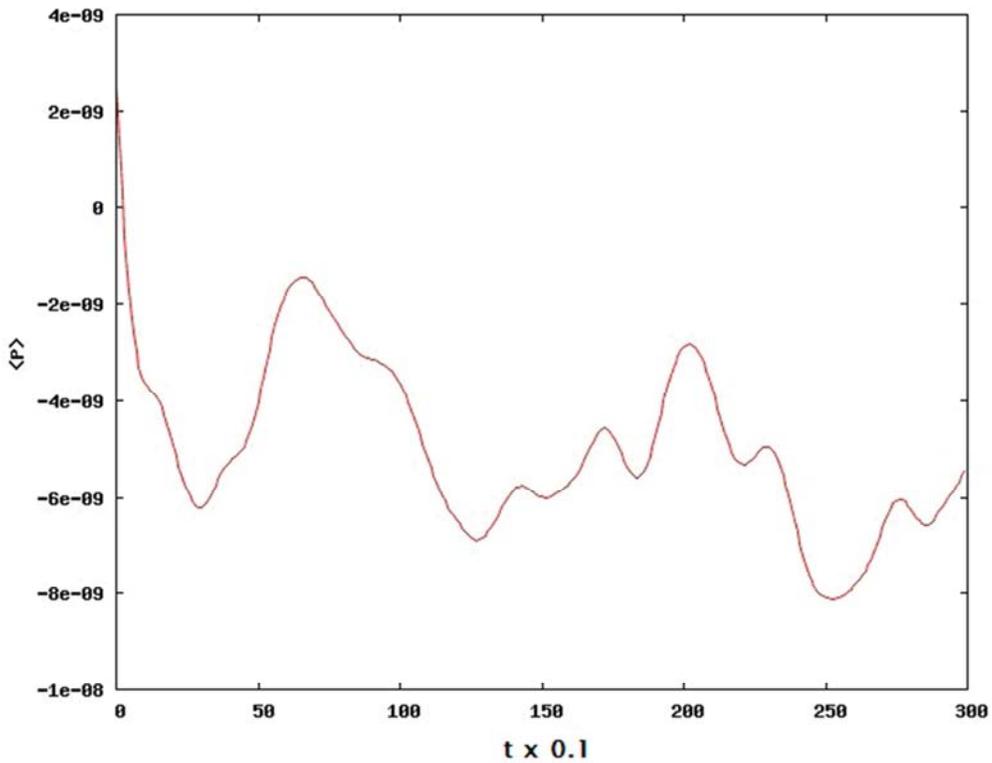
Figura 4.12. Evolución de un paquete de ondas con energía inicial  $E_0 = 0$ , sujeto a un potencial de la forma  $V(x) = 0.1[1 + \cos(kx - \pi)]$

En la gráfica anterior, se puede observar que la mayor amplitud de probabilidad del paquete de ondas al evolucionar en el tiempo, se encuentra centrada justamente en el punto inicial  $x_0 = 0$ , de tal forma que es posible afirmar que a medida que pase el tiempo el comportamiento será, principalmente de atrapamiento toda vez que la probabilidad de tunelaje es pequeña aunque, como se ve para  $t = 26.9$  ya empieza a presentarse, aunque este es simétrico alrededor de  $x_0 = 0$ .

Lo anterior, se puede verificar con el cálculo de los valores esperados de la posición  $\langle x(t) \rangle$  y el momento lineal  $\langle p(t) \rangle$ , tal como lo indican a continuación las siguientes figuras.



**Figura 4.13.** Valor esperado de la posición  $\langle x(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano con energía inicial  $E_0 = 0$ , sujeto a un potencial  $V(x) = 0.1[1 + \cos(kx - \pi)]$  para 300,000 pasos temporales.



**Figura 4.14.** Valor esperado del momento lineal  $\langle p(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano con energía inicial  $E_0 = 0$ , sujeto a un potencial  $V(x) = 0.1[1 + \cos(kx - \pi)]$  para 300,000 pasos temporales.

En las figuras anteriores 4.13 y 4.14 para el valor esperado de la posición  $\langle x(t) \rangle$  y el momento lineal  $\langle p(t) \rangle$ , respectivamente, se puede observar el hecho de que dentro de la precisión numérica, tienen un valor de cero ambos, ya que la partícula en promedio permanece en la misma posición inicial de  $x_0 = 0$ , por lo que además su velocidad es nula.

Por otra parte, se llevó a cabo el estudio de la evolución de un paquete de ondas de tipo Gaussiano centrado con una energía  $E_0 = 0$ , de igual forma que el caso anterior, en  $x_0 = 0$ , considerando ahora el potencial descrito por  $V(x) = 0.5[1 + \cos(kx - \pi)]$ , el cual posee una amplitud máxima de  $V_{\max} = 1$ . En este caso, se hicieron un total de 300,000 evoluciones temporales, lo que se puede apreciar en la siguiente gráfica que incluye evoluciones de un tiempo inicial  $t_0 = 0$  a un tiempo final  $t_f = 23.4$ .

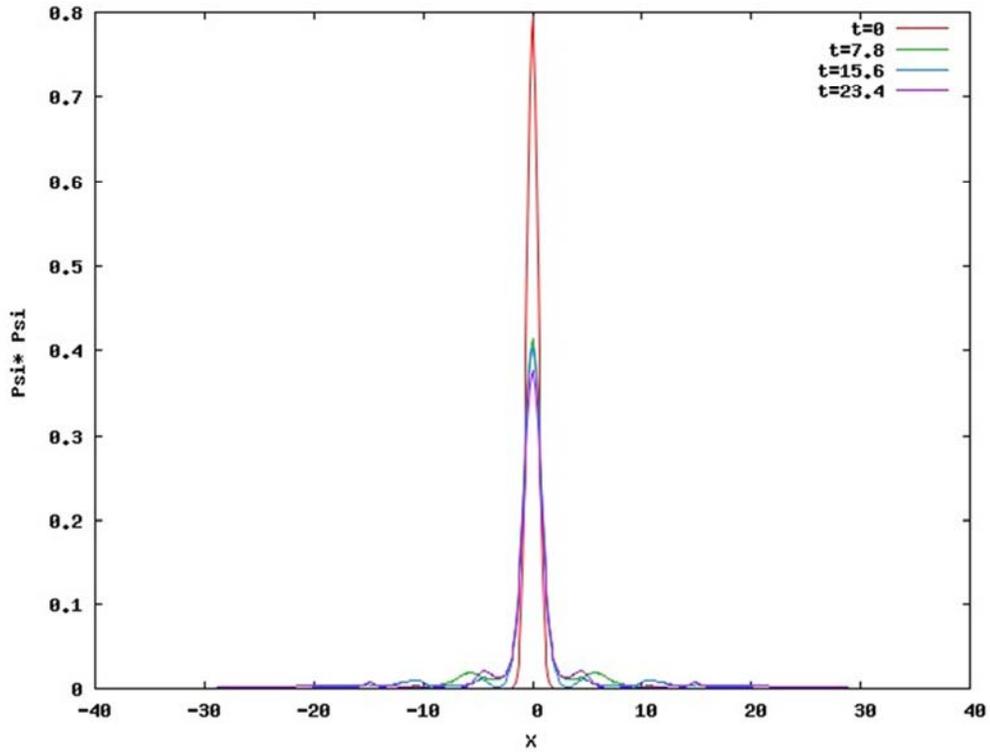


Figura 4.15. Evolución de un paquete de ondas con energía inicial  $E_0 = 0$ , sujeto a un potencial de la forma  $V(x) = 0.5[1 + \cos(kx - \pi)]$

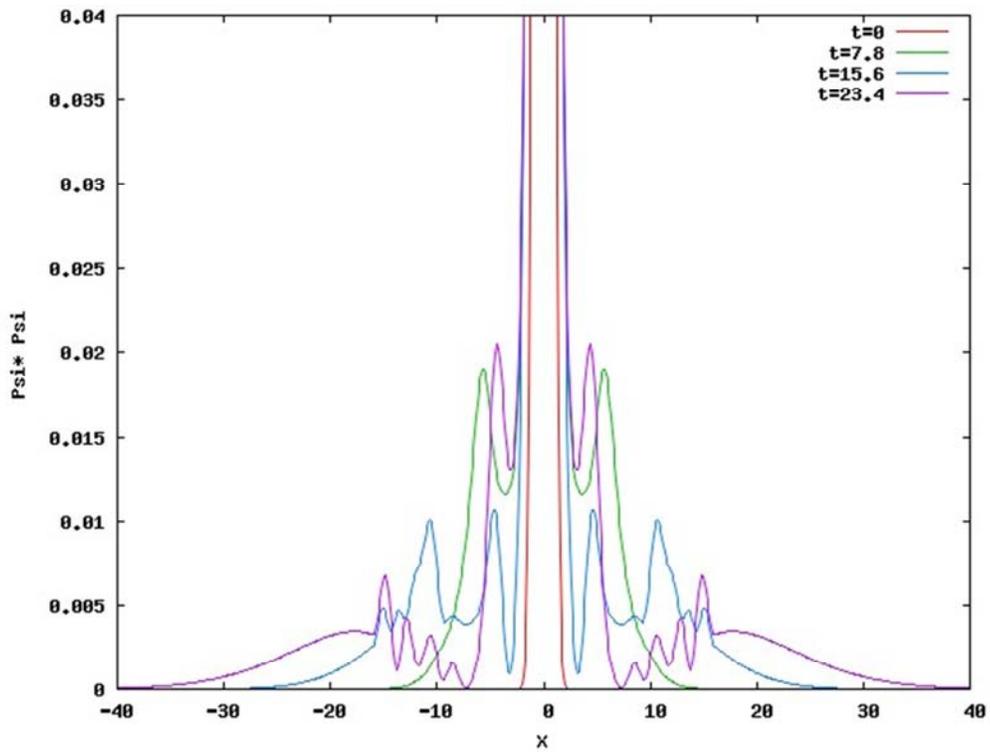
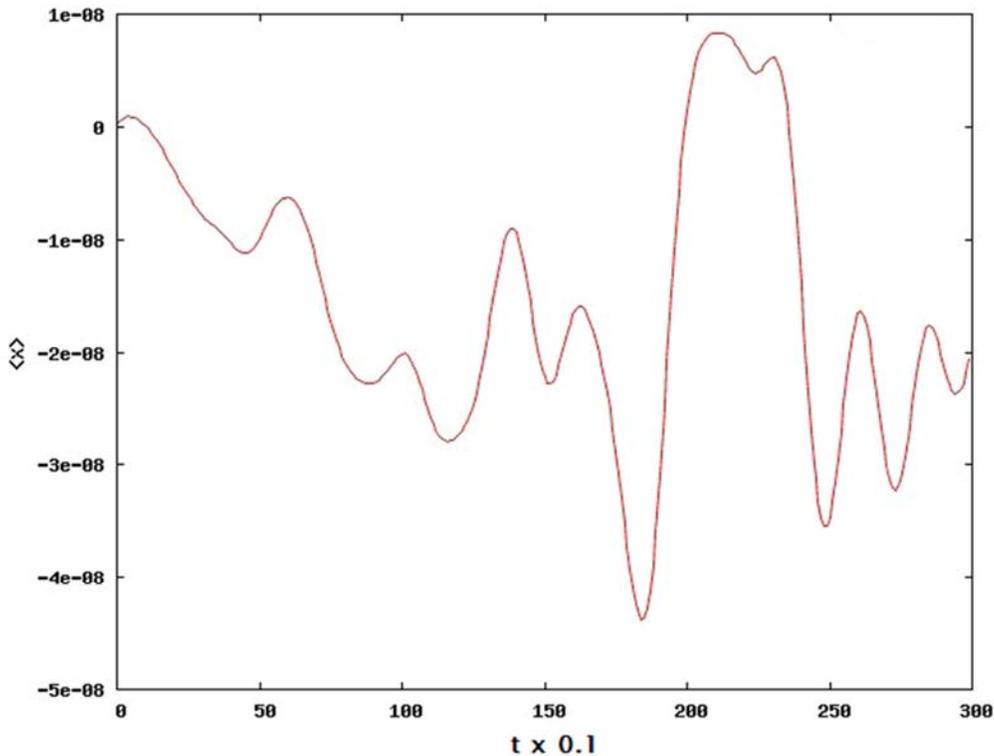


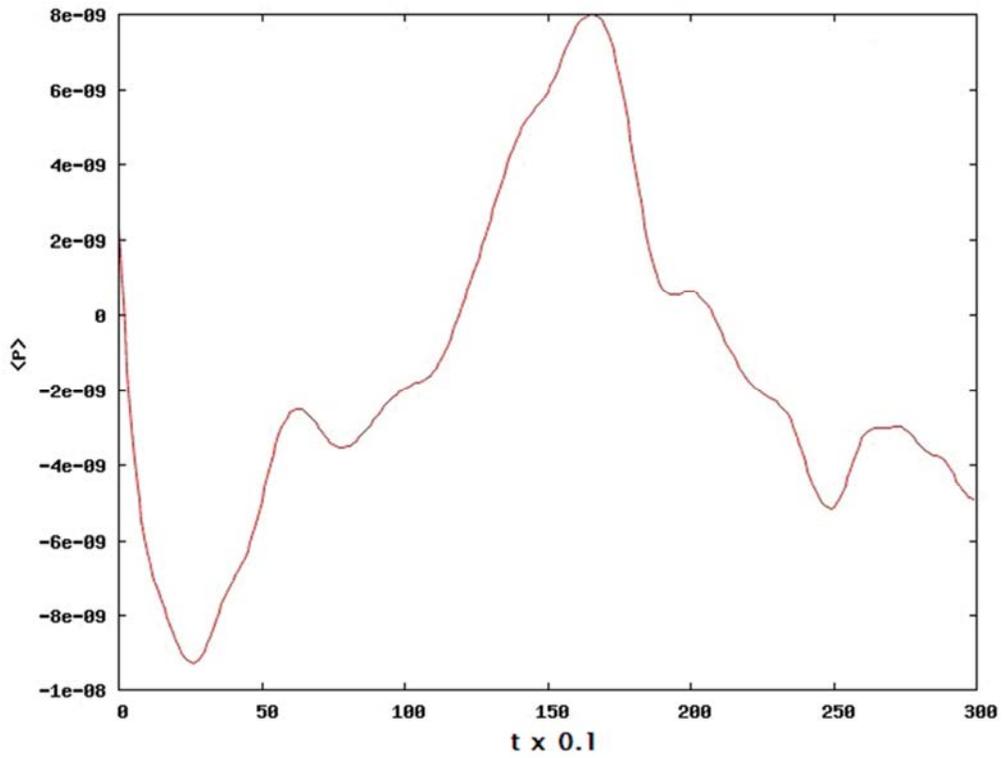
Figura 4.16. Ampliación de la figura 4.14 de la evolución de un paquete de ondas con energía inicial  $E_0 = 0$ , sujeto a un potencial de la forma  $V(x) = 0.5[1 + \cos(kx - \pi)]$

En este caso, la energía del máximo de potencial es mayor 5 veces con respecto al caso anterior. Dado lo anterior, se puede observar en la evolución temporal del paquete de ondas, su amplitud de probabilidad permanece en la misma posición inicial en promedio. La probabilidad de que la partícula evolucione hacia la izquierda o hacia la derecha del mínimo de potencial, es mínima, sin embargo pueden existir efectos de tunelamiento menores.

De igual forma, podemos corroborar lo anterior con las siguientes graficas en donde se muestran los valores esperados de la posición  $\langle x(t) \rangle$  y el valor esperado del momento lineal  $\langle p(t) \rangle$ , los cuales, dentro de la precisión numérica, son completamente nulos. Esto debido a que, como habíamos dicho en el párrafo anterior, la máxima amplitud de probabilidad de la partícula permanece en su posición inicial de  $x_0 = 0$ .



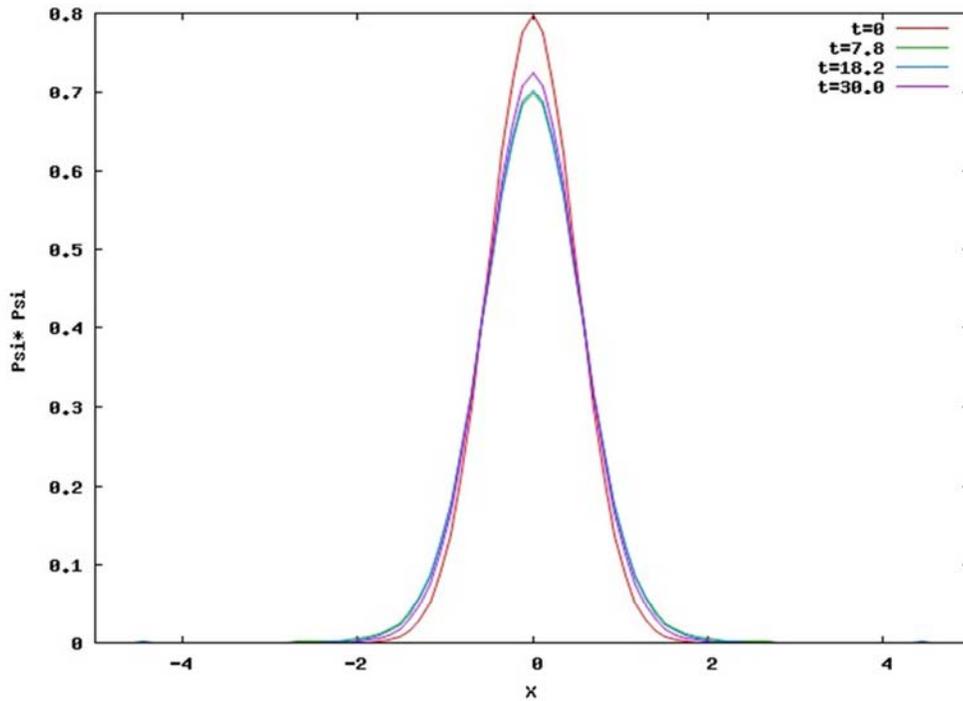
**Figura 4.17.** Valor esperado de la posición  $\langle x(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano con energía inicial  $E_0 = 0$ , sujeto a un potencial  $V(x) = 0.5[1 + \cos(kx - \pi)]$  para 300,000 pasos temporales.



**Figura 4.18.** Valor esperado del momento lineal  $\langle p(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano con energía inicial  $E_0 = 0$ , sujeto a un potencial  $V(x) = 0.5[1 + \cos(kx - \pi)]$  para 300,000 pasos temporales.

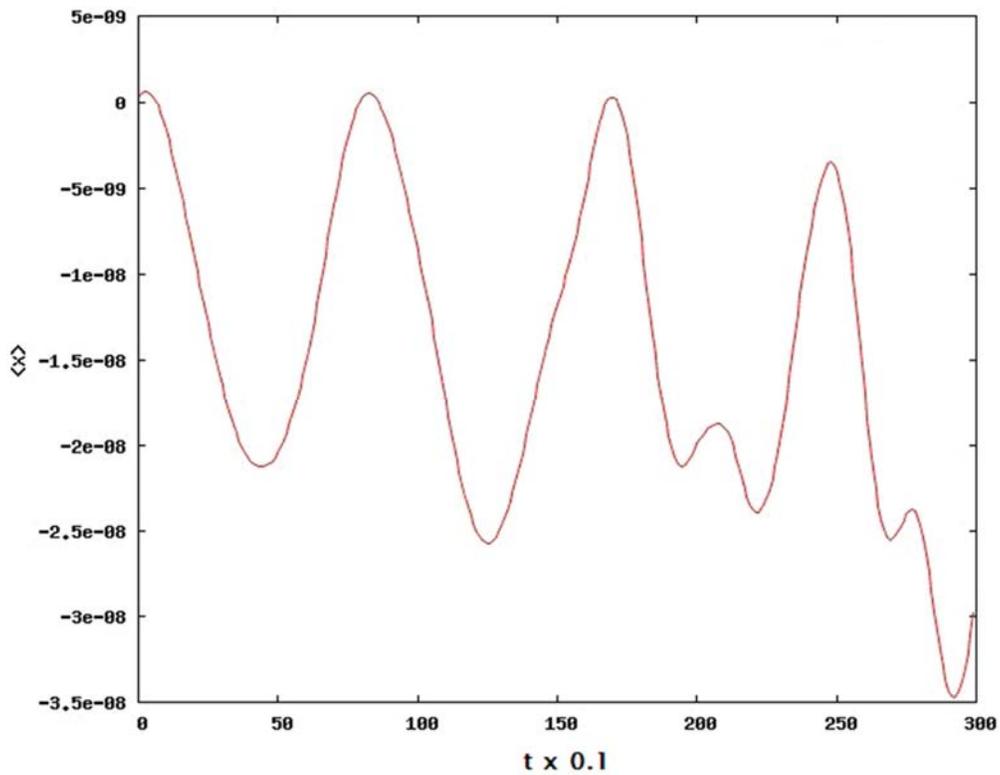
Finalmente cerramos esta sección con el caso de una energía inicial  $E_0 = 0$ , para un paquete de ondas de tipo Gaussiano, de igual forma centrado en la posición inicial de  $x_0 = 0$ , Ahora, para un potencial sinusoide que tiene un valor máximo de  $V_{\max} = 7$ , donde su ecuación es de la forma  $V(x) = 3.5[1 + \cos(kx - \pi)]$ .

Su evolución temporal puede ser apreciada en la siguiente figura 4.19, donde se muestra un total de 300,000 pasos temporales, desde un tiempo inicial  $t_0 = 0$  hasta un tiempo final de  $t_f = 30$ .

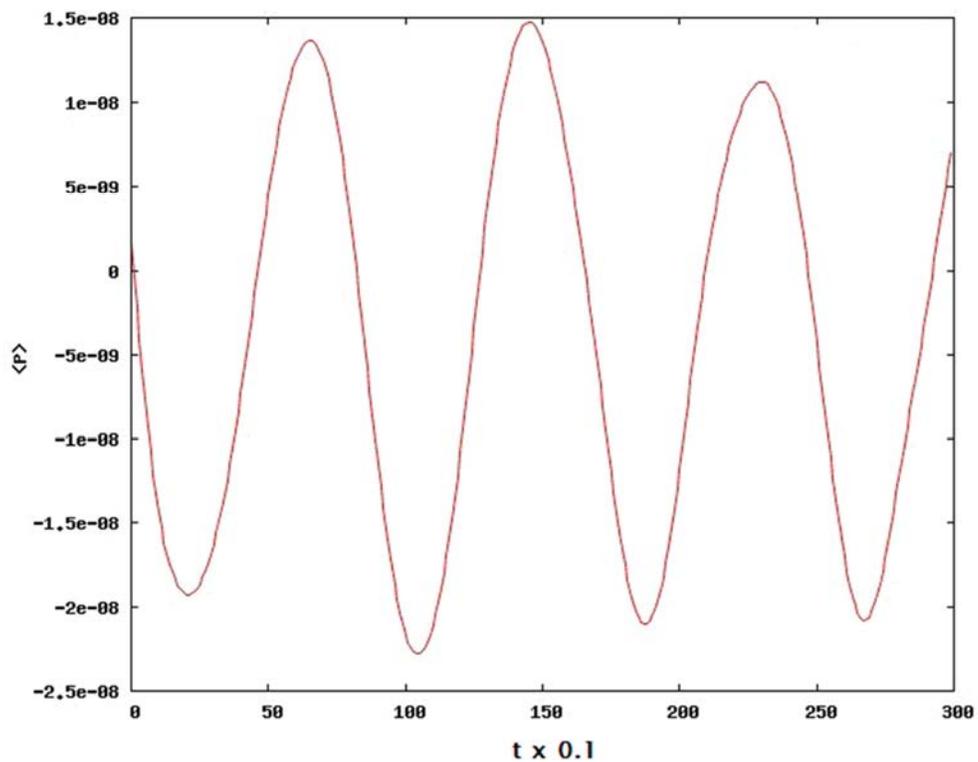


**Figura 4.19.** Evolución de un paquete de ondas con energía inicial  $E_0 = 0$ , sujeto a un potencial de la forma  $V(x) = 3.5[1 + \cos(kx - \pi)]$

Dado que la energía del máximo de potencial se aumentó 17.5 veces, comparado con respecto al potencial inicial de  $V_{\max} = 0.2$ , se puede observar que la mayor amplitud de probabilidad de la partícula se encuentra en la posición inicial  $x_0 = 0$ , donde los efectos de tunelaje son aún menos probables y el atrapamiento local en este mínimo del potencial es más evidente. Todo esto, porque la energía de la partícula es mucho menor que la energía del potencial, por lo que su valor esperado de posición  $\langle x(t) \rangle$  es cero y su valor esperado de momento lineal  $\langle p(t) \rangle$  es nulo, y lo que lleva a que la probabilidad de movimiento es casi nula, como es de esperarse, dado que queda confinada en el mínimo donde inicio su evolución, tal como se muestran en las figuras 4.20 y 4.21.



**Figura 4.20.** Valor esperado de la posición  $\langle x(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano con energía inicial  $E_0 = 0$ , sujeto a un potencial  $V(x) = 3.5[1 + \cos(kx - \pi)]$  para 300,000 pasos temporales.



**Figura 4.21.** Valor esperado del momento lineal  $\langle p(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano con energía inicial  $E_0 = 0$ , sujeto a un potencial  $V(x) = 3.5[1 + \cos(kx - \pi)]$  para 300,000 pasos temporales.

En los ejemplos anteriores, se pudo observar que el paquete de ondas se mantiene en la posición inicial, esto corroborado con la gráfica 4.20 del valor esperado de la posición  $\langle x(t) \rangle$ . Además, se observan fenómenos de atrapamiento más notorios conforme el valor máximo del potencial es mucho mayor que la energía inicial del paquete de ondas, por lo que es lógico su confinamiento en el mínimo inicial donde se originó la evolución temporal de este paquete de ondas. Y por el contrario, en los valores donde el valor del máximo potencial es cercano al valor de la energía inicial de la partícula, la probabilidad de tunelamiento es mayor que en los casos anteriores, y es posible observar tales fenómenos, aclarando que la amplitud de probabilidad del paquete de ondas es mucho mayor en la posición inicial con respecto a otras posiciones, dado que su energía es nula.

#### **4.4 Evolución temporal de un paquete de ondas Gaussiano con una energía inicial diferente de cero, contenido en un mínimo de un potencial senoide.**

En esta sección se estudia la evolución temporal de un paquete de ondas de tipo Gaussiano, el cual está “localizado” en una posición inicial  $x_0 = 0$ , la cual representa un mínimo del potencial senoide, al igual que las situaciones estudiadas anteriormente. La diferencia con los ejemplos anteriores es el hecho de que el paquete de ondas evolucionará hacia la izquierda o hacia la derecha con una velocidad inicial  $v_0$  diferente de cero, todo esto con el fin de observar los efectos de tunelaje y atrapamiento local, al igual que el cálculo de los valores esperados de la posición, momento lineal y energía, tal como se ha venido haciendo durante este trabajo. De igual forma, los parámetros utilizados para llevar a cabo esta simulación son los mismos planteados inicialmente en la sección 4.2.

Entrando en materia, iniciamos el estudio de la evolución de un paquete de ondas de tipo Gaussiano centrado en  $x_0 = 0$  y con energía inicial de  $E_0 = 3$ , donde en un valor de potencial  $V(x) = [1 + \cos(kx - \pi)]$ , el cual describe una amplitud máxima de  $V_{\max} = 2$ . Se llevó a cabo el estudio de una evolución temporal para 182,000 pasos temporales. En la figura 4.22 se puede apreciar la evolución de un tiempo inicial  $t_0 = 0$ , hasta un tiempo final  $t_f = 10.2$ , tal como se muestra a continuación.

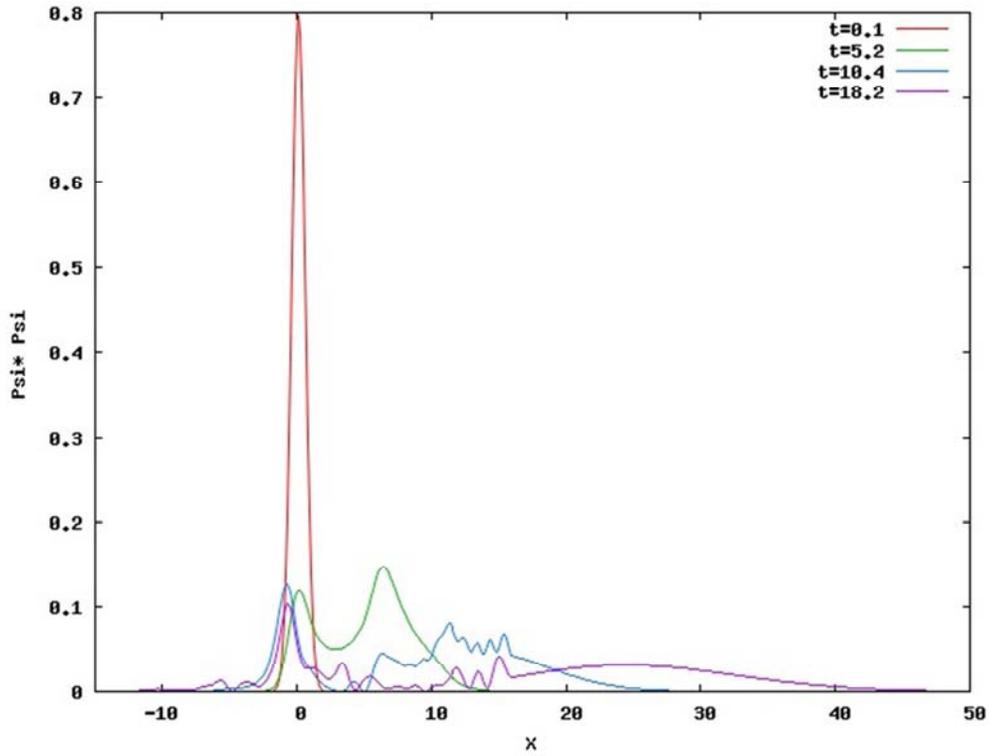


Figura 4.22. Evolución de un paquete de ondas con energía inicial  $E_0 = 3$ , sujeto a un potencial de la forma  $V(x) = [1 + \cos(kx - \pi)]$ .

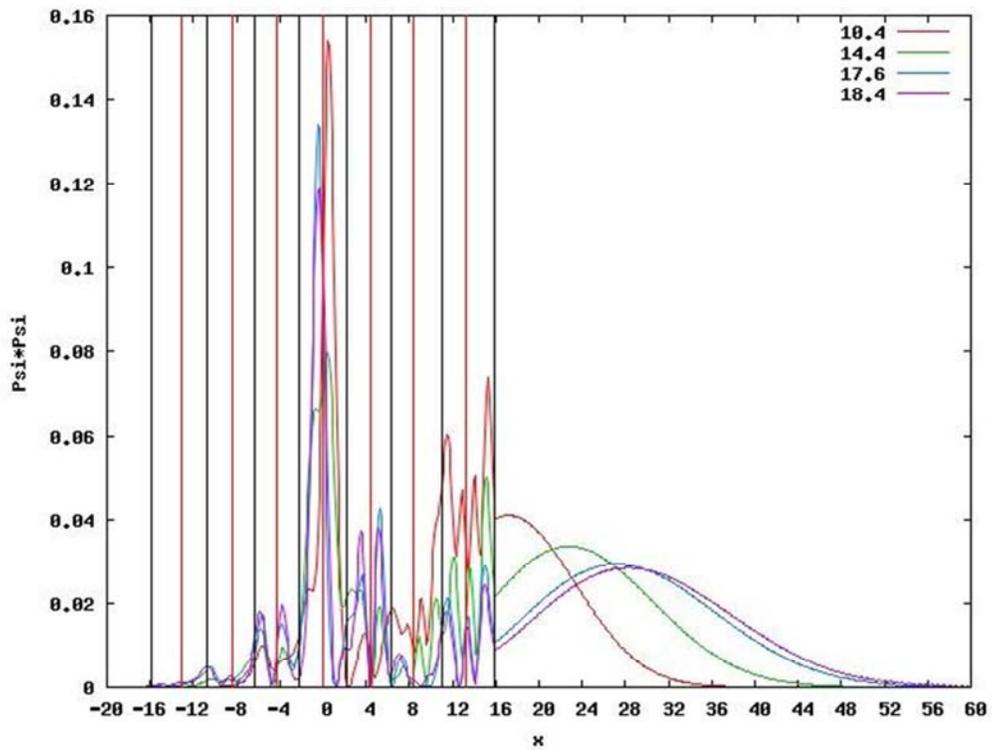
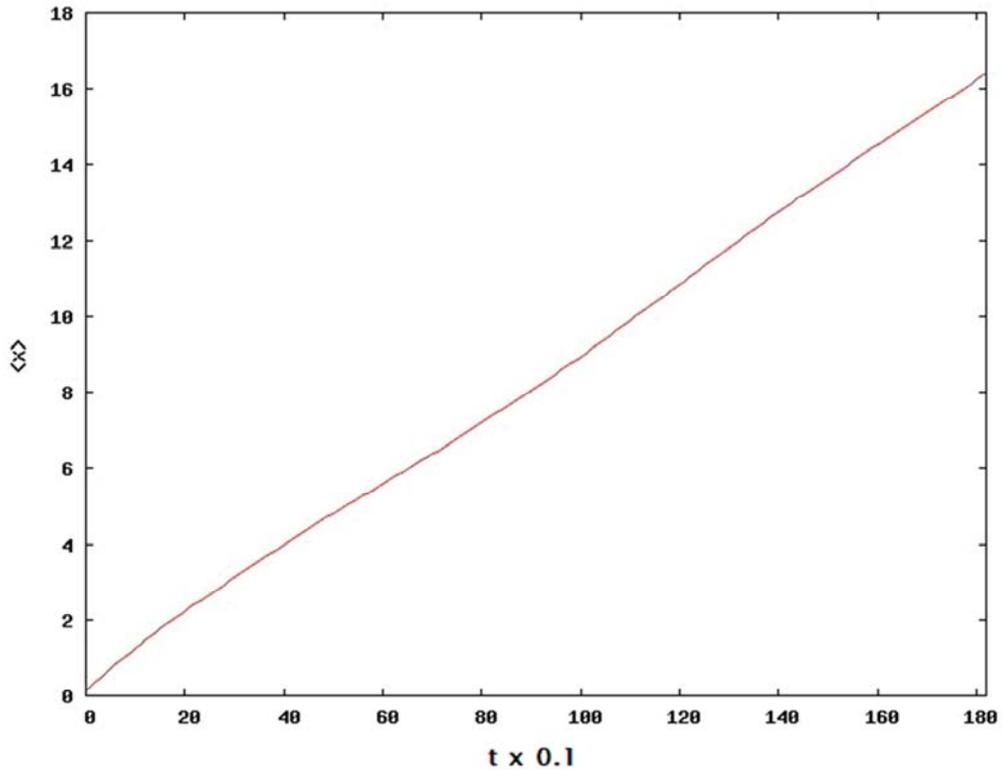
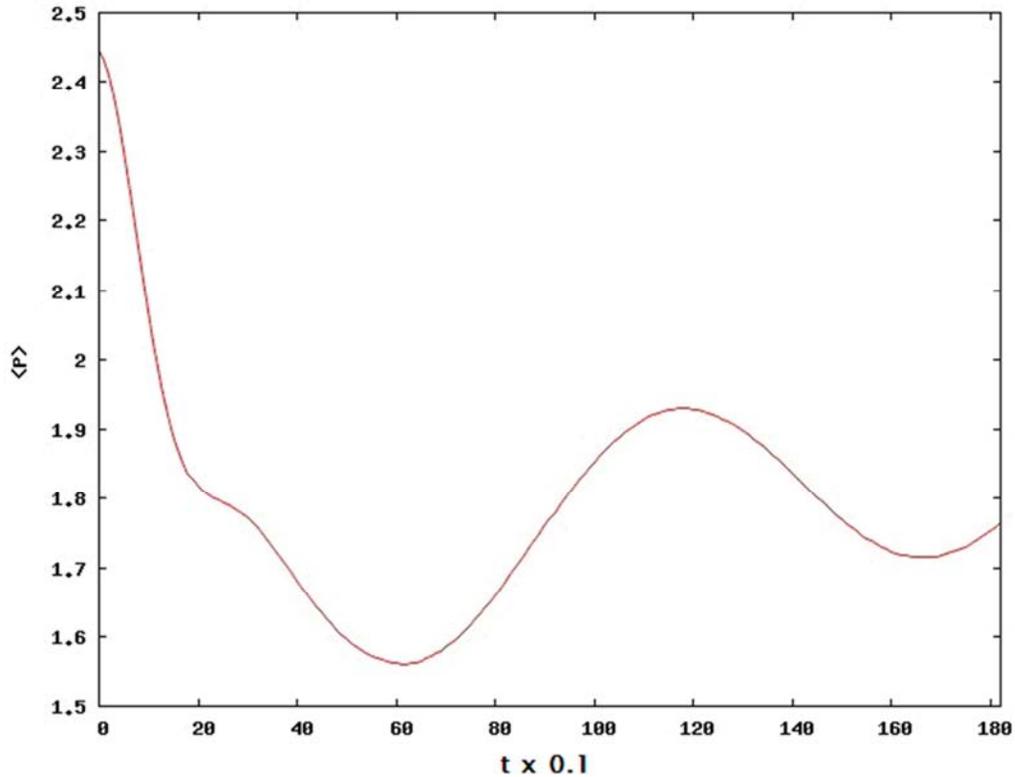


Figura 4.23. Ampliación de la figura 4.22 de la evolución de un paquete de ondas con energía inicial  $E_0 = 3$ , sujeto a un potencial de la forma  $V(x) = [1 + \cos(kx - \pi)]$

Se puede observar una tendencia casi lineal en la evolución temporal del paquete de ondas, que a pesar de que decrece su amplitud máxima de probabilidad conforme el tiempo avanza, este se propaga hacia la derecha. También esto se puede verificar en el cálculo del valor esperado de la posición  $\langle x(t) \rangle$ , de acuerdo a la figura 4.24.



**Figura 4.24.** Valor esperado de la posición  $\langle x(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano con energía inicial  $E_0 = 3$ , sujeto a un potencial  $V(x) = [1 + \cos(kx - \pi)]$  para 182,000 pasos temporales.



**Figura 4.25.** Valor esperado del momento lineal  $\langle p(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano con energía inicial  $E_0 = 3$ , sujeto a un potencial  $V(x) = [1 + \cos(kx - \pi)]$  para 182,000 pasos temporales.

Como es de esperarse, el paquete de ondas se propaga hacia la derecha, dado que  $E_0$  es mayor que  $V_{\max}$ , además se puede observar que conforme avanza el paquete de ondas, este va perdiendo velocidad conforme empieza a tunear y toma más velocidad conforme alcanza los mínimos perdiendo velocidad al llegar a los máximos del potencial al momento de tunear nuevamente. La velocidad disminuye de un tiempo  $t = 0$  a  $t = 6.2$ , y aumenta de  $t = 6.2$  a  $t = 11.95$  y nuevamente disminuye de  $t = 11.95$  a  $t = 16.5$ .

Por otra parte, considerando el mismo potencial anterior, en este caso con una energía inicial del paquete de ondas, la cual representa el doble del caso anterior, es decir,  $E_0 = 6$ . Por lo que se puede observar que para una evolución de tiempo inicial  $t_0 = 0$  a un tiempo final  $t_f = 18.2$ , tal como el caso anterior, el paquete de ondas evoluciona con mayor rapidez dado que su energía es mucho mayor y es posible que penetre al máximo de potencial con menos dificultad, lo cual puede observarse en la gráfica 4.26.

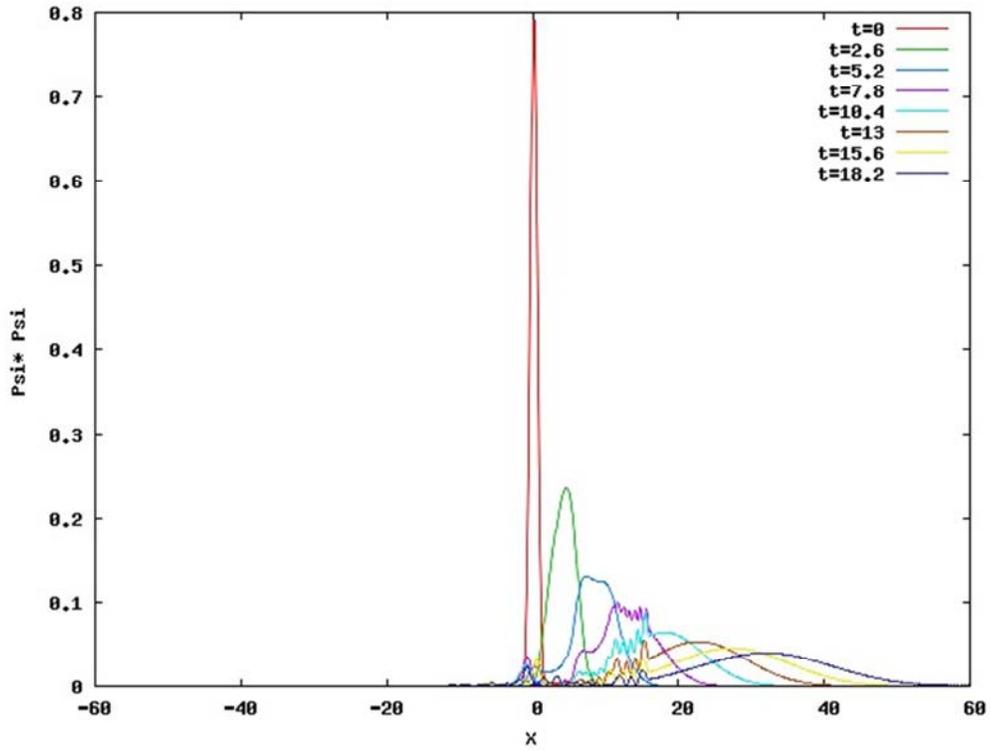


Figura 4.26. Evolución de un paquete de ondas con energía inicial  $E_0 = 6$ , sujeto a un potencial de la forma  $V(x) = [1 + \cos(kx - \pi)]$

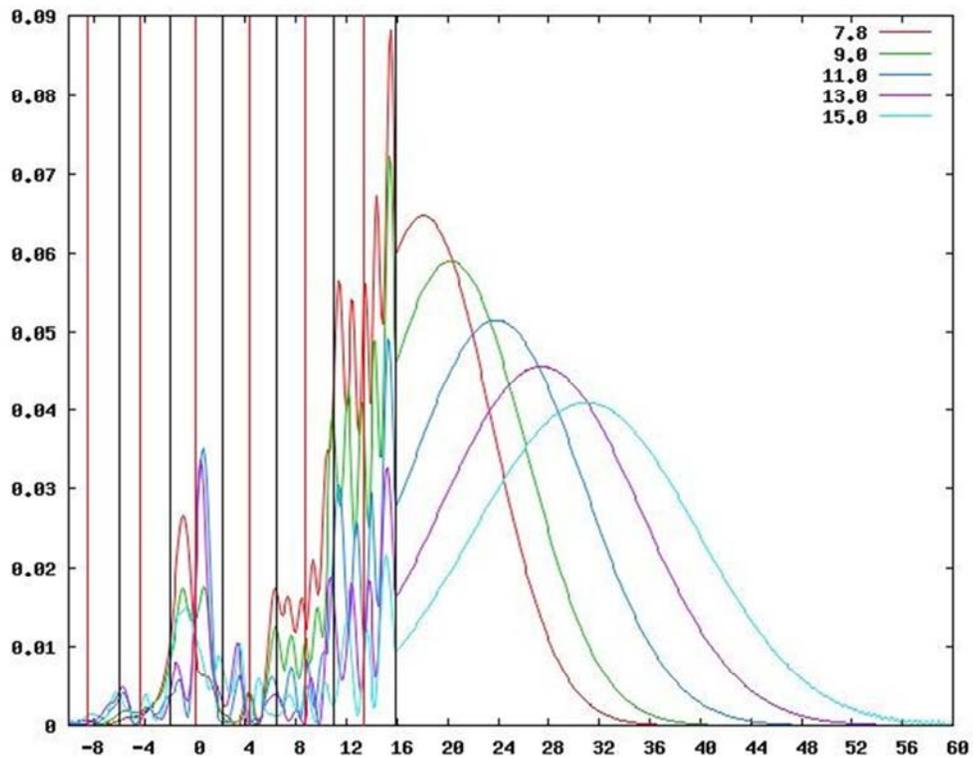
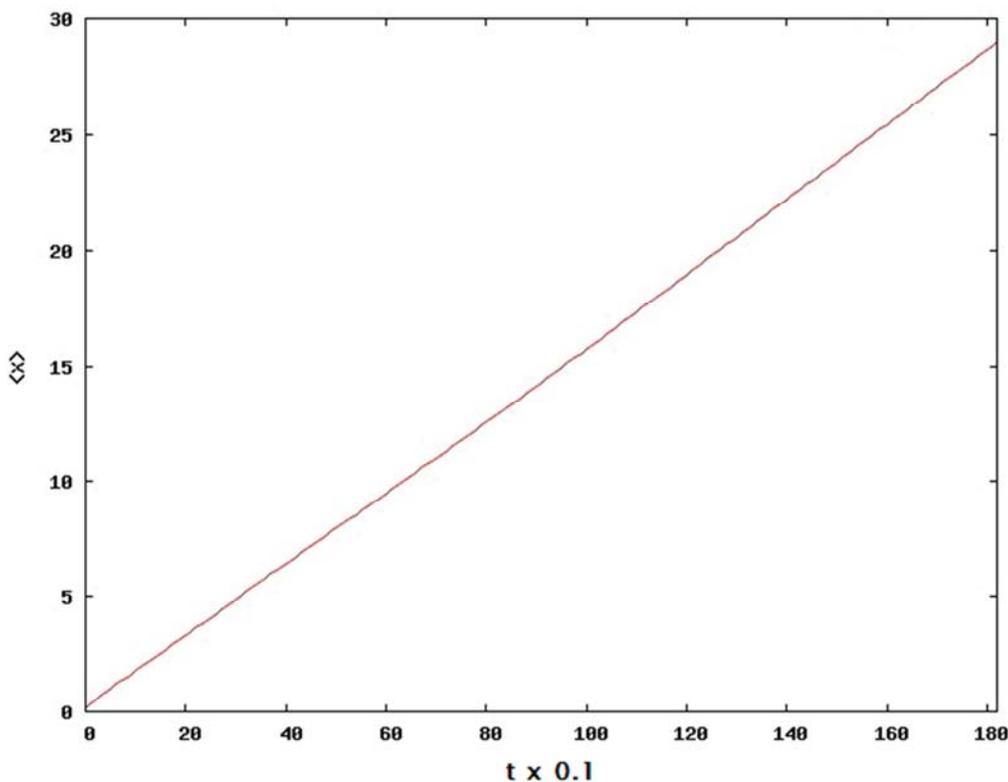


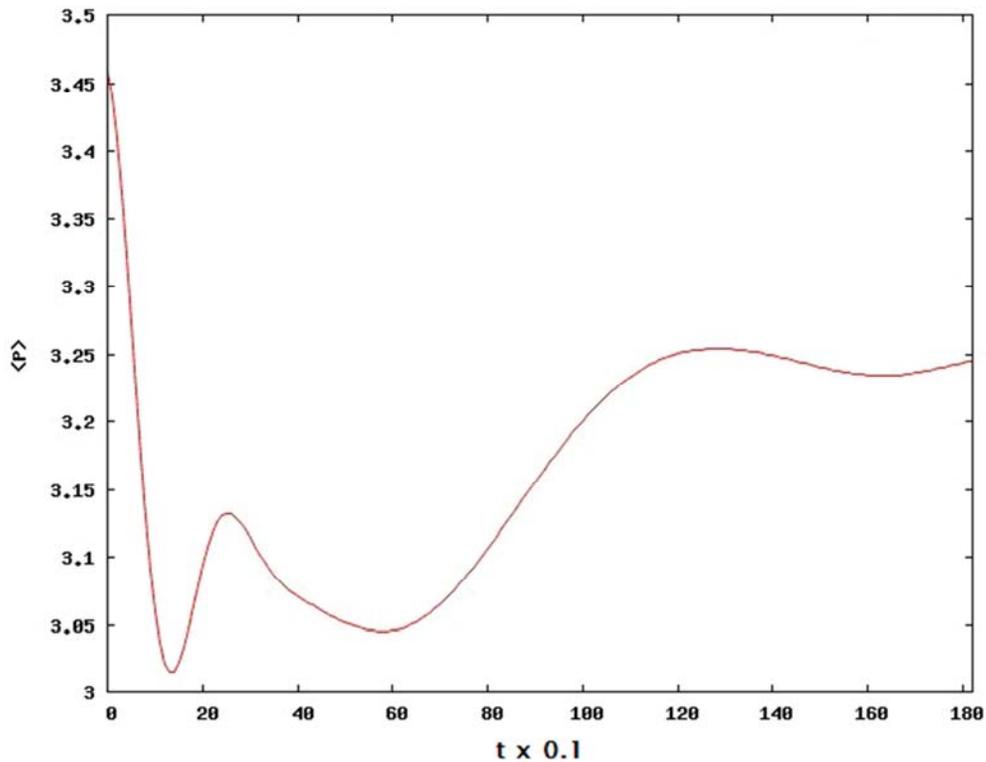
Figura 4.27. Ampliación de la figura 4.26 de la evolución de un paquete de ondas con energía inicial  $E_0 = 6$ , sujeto a un potencial de la forma  $V(x) = [1 + \cos(kx - \pi)]$

Es evidente que la tendencia de evolución temporal es marcada hacia el lado derecho, pudiendo tunelear con más facilidad que el caso anterior, dado que su energía inicial es mucho mayor. Por lo que en el valor esperado  $\langle x(t) \rangle$ , se puede observar una tendencia lineal cada vez mayor en la gráfica del valor esperado de la posición,  $\langle x(t) \rangle$ . Por lo que el atrapamiento local es mínimo tal como se muestra en la Figura 4.28.



**Figura 4.28.** Valor esperado de la posición  $\langle x(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano con energía inicial  $E_0 = 6$ , sujeto a un potencial  $V(x) = [1 + \cos(kx - \pi)]$  para 182,000 pasos temporales.

La velocidad disminuye de un tiempo  $t = 0$  a  $t = 16.2$ , y aumenta de  $t = 16.2$  a  $t = 23.45$  y nuevamente disminuye de  $t = 23.45$  a  $t = 58.5$ . Además cabe mencionar, que el paquete de ondas incrementa drásticamente su velocidad desde el tiempo  $t = 58.5$  a  $128.5$ , lo cual significa que en los puntos de disminución de velocidad es donde comienza a tunelear y donde la velocidad es mayor, ha alcanzado un mínimo del potencial, estos máximos y mínimos de velocidad pueden apreciarse en la figura 4.29.



**Figura 4.29.** Valor esperado del momento lineal  $\langle p(t) \rangle$  en la evolución de un paquete de ondas Gaussiano con energía inicial  $E_0 = 6$ , sujeto a un potencial  $V(x) = [1 + \cos(kx - \pi)]$  para 182,000 pasos temporales.

En los ejemplos anteriores se puede observar un paquete de ondas confinado en un mínimo de potencial, con una energías iniciales mayores que las energías de los máximos del potencial sinusoide. La evolución temporal se propaga hacia el eje  $x$  positivo mostrando fenómenos de tunelamiento cada vez mayores, conforme se aumenta la energía con respecto al potencial y fenómenos de atrapamiento de poca probabilidad de ello, en el caso de energías cercanas al valor de los máximos del potencial sinusoide.



# RESUMEN Y CONCLUSIONES

## Resumen

Como fue mencionado en la introducción de este trabajo de tesis, el estudio de la propagación de partículas en medios espacialmente periódicos tiene una amplia historia en la mecánica cuántica desde sus inicios, con trabajos en esta dirección como los desarrollados por P.M. Morse [1], por Davidson y Germer y por George P. Thomson [2], entre otros; dicho interés se ha mantenido, tal como lo prueban experimentos y trabajos más reciente, como los desarrollados por Martin, Oldaker, Miklich y Pritchard [4], H. P. Simanjuntak y P. Pereyra [5], Y. G. Peisakhovich y A. A. Shtygashev [6], y M. Horne, I. Jex y A. Zeilinger [7], por mencionar algunos.

Así que tomando como referencia este último aspecto, decidimos abocarnos al estudio de un sistema cuántico consistente de una partícula sujeta a un potencial localizado espacialmente y que presenta una periodicidad local, similar al propuesto por M. Horne, I. Jex y A. Zeilinger [7], toda vez que si conocemos la evolución temporal del paquete de ondas correspondiente, estamos en posibilidad de calcular las diferentes cantidades físicas mediante las expresiones de los valores de expectación que correspondan.

Como un primer punto en nuestro estudio, y antes de entrar en la parte medular del trabajo, consideramos adecuado hacer un breve repaso a algunas ideas básicas de la mecánica cuántica, lo cual hacemos en el capítulo 1, mientras que en el capítulo 2 fue necesario construir todo un conjunto de herramientas numéricas que nos permitiera realizar de manera adecuada, y lo más eficiente posible, la evolución temporal de nuestro sistema cuántico sujeto a un potencial arbitrario  $V(x)$ .

Es importante mencionar que, antes de utilizar dichas herramientas y métodos de solución de la Ecuación de Schrödinger correspondiente a nuestro sistema de interés, estas fueron puestas a prueba en el análisis de dos problemas muy estudiados en los cursos de física cuántica: la partícula libre y el oscilador armónico, lo cual fue presentado en el capítulo 3. El primero de ellos, desarrollado en la primera parte de dicho capítulo, consideró un paquete de ondas colocado inicialmente sin velocidad y posteriormente se consideró un paquete de ondas con velocidad inicial; en ambos casos los resultados obtenidos estuvieron acordes a las soluciones analíticas correspondientes. En la segunda parte de dicho capítulo se analizó la dinámica de un paquete de ondas sujeta a un potencial armónico, considerando un paquete de ondas en reposo y posteriormente con una cierta velocidad inicial, de nuevo, en ambos casos las soluciones obtenidas numéricamente estuvieron en completa concordancia con la dinámica del oscilador armónico.

Así que una vez construida, y probada de manera satisfactoria la eficiencia de nuestra herramienta numérica, procedimos a estudiar la evolución de un paquete de ondas sujeto a un potencial sinusoidal localizado en una región finita del espacio, en particular el potencial estudiado fue de la forma:

$$V(x) = -2[1 - \text{Cos}(kx - \pi)]$$

en el que consideramos  $k = 1.3793$ , y espacialmente localizado entre  $a = -16$  y  $b = 16$ .

Cuando se estudió la evolución temporal del paquete de ondas sujeta al potencial sinusoidal mencionado en el párrafo anterior, pudimos advertir que las soluciones obtenidas se comportan de manera adecuada al sistema cuántico que están representando.

Lo anterior nos permite afirmar que podemos usarlas para calcular los observables que deseemos; por ejemplo, en las figuras 4.7, 4.11, 4.14, 4.18, 4.21, 4.25 y 4.29 que corresponden al valor de expectación del momento  $\langle p(t) \rangle$  podemos ver cómo se modifica, conforme el paquete de onda se aproxima y penetra en la zona del potencial sinusoidal.

En la misma tónica, el valor de la energía  $\langle E(t) \rangle$  se conserva; mientras que las gráficas de la posición  $\langle x(t) \rangle$  corresponden al movimiento de una partícula sujeta a tal potencial periódico, que presenta un avance modulado por la intensidad del potencial.

En el desarrollo de los cálculos de la evolución temporal se consideraron varios valores de velocidad inicial para el paquete de onda, encontrando que a mayor velocidad inicial la propagación a través del espacio se realizaba de manera más rápida, como era de esperarse; mientras que para los casos con menor rapidez se vio que la penetración era más lenta, además se advierte la aparición de algo que podemos considerar que corresponde a un “atrapamiento” de la partícula, ya que aparte de ir disminuyendo la amplitud de probabilidad, se nota un retroceso en el avance del valor máximo de expectación de la partícula, lo que asociamos con la probabilidad de encontrar a la partícula, conforme avanza el tiempo en una posición retrasada.

El fenómeno mencionado anteriormente se presentó alrededor de los diferentes mínimos locales que presenta el potencial sinusoidal considerado, lo cual se evidenció en las figuras 4.5 y 4.9, siendo mayor dicho efecto en la figura 4.5. Lo anterior abre la posibilidad de calcular, no sólo valores de expectación de los diferentes observables, sino también el explorar las condiciones de velocidad del paquete de ondas, así como de las características del potencial que aumentan este efecto, como un mecanismo de atrapamiento cuántico de partículas.

## Conclusiones

Como anotaciones finales, y a manera de conclusión al presente trabajo, queremos dejar establecidos cuáles fueron los logros y aportes de nuestro estudio, así como cuáles son las líneas de investigación que han quedado abiertas y que pueden ser incluidas en trabajos a realizar en el futuro.

Como parte de los logros podemos enumerar los siguientes

- Se logró establecer satisfactoriamente un esquema de solución numérica para la ecuación de Schrödinger, de tal forma que es posible seguir la evolución temporal del estado de un sistema mediante la descripción de función de onda.
- Para obtener esta evolución se desarrolló un método numérico que es aplicable para cualquier Hamiltoniano, incluso cuando este depende del tiempo (tal como lo sugieren D. Kosloff y R. Kosloff). Finalmente debemos mencionar que para el desarrollo de dicho método fue necesario implementar en un programa FORTRAN el algoritmo de la Transformada Rápida de Fourier (FFT), lo que permitió realizar los cálculos de manera bastante eficiente y precisa.
- Se reprodujo la evolución temporal de un paquete de ondas correspondiente a una partícula libre, encontrándose que la solución numérica, como debe ser, presenta el fenómeno de dispersión; además, los valores de expectación de la posición, el momento y la energía que se calcularon a partir de los estados construidos en la evolución se comportan como lo predice la mecánica cuántica.
- Al estudiar la evolución del paquete de ondas sujeto a un potencial cuadrático, los resultados obtenidos estuvieron acordes a lo esperado, tanto para la posición  $\langle x(t) \rangle$  como para el momento  $\langle p(t) \rangle$ , mientras que la energía  $\langle E(t) \rangle$  se conservó durante toda la evolución que realizamos.
- De manera similar, cuando estudiamos el potencial periódico (sinusoidal) localizado obtuvimos funciones de onda acordes a la física del sistema, de tal forma que podemos usarlas para calcular los observables que deseemos; lo anterior nos permite afirmar que nuestra herramienta funciona de manera muy satisfactoria para el caso de un potencial sinusoidal, y no sólo eso, sino que estamos convencidos que también lo hará para cualquier potencial unidimensional que consideremos, bastando tener cierto cuidado en las condiciones numéricas para tener la evolución correcta.

Una vez enumerados algunos de los logros y aportes de nuestro trabajo de tesis, es conveniente y necesario puntualizar cuáles son, a nuestro criterio, las líneas que han quedado abiertas, así como los posibles trabajos a futuro, y que básicamente son los siguientes:

- Con base en la experiencia adquirida durante el desarrollo del presente trabajo consideramos que tenemos la herramienta numérica, tal como se menciona en los logros, que nos permitirá estudiar con más detalle la evolución de un sistema sujeto a potenciales localizados con otro tipo de periodicidad, por ejemplo, barreras múltiples o pozos de potencial múltiples, que si bien es cierto ya han sido estudiados por métodos analíticos, también se pueden hacer por la vía empleada en nuestro trabajo, y en el cual se pueden considerar situaciones en las que la energía del paquete de ondas corresponda o no, a las regiones permitidas del potencial en cuestión, lo que permitiría analizar fenómenos de transmisión y reflexión del paquete al incidir en dichos potenciales.
- Otra línea que queda pendiente, y que consideramos puede ser estudiada con más detalle con nuestra herramienta, es el fenómeno de “atrapamiento local” que se observaron en el desarrollo del presente trabajo y que fueron mostradas en las figuras 5 y 9 del capítulo IV, considerando no sólo el caso de un potencial sinusoidal, sino algún otro tipo de potencial que presente cierta periodicidad localizada espacialmente.

## BIBLIOGRAFIA

- [1] Morse P.M. *The Quantum Mechanics of Electrons in Crystals*, Phys. Rev. **35**, 1310 (1930)
- [2] Thomson G. P. *Experiments on the Diffraction of Cathode Rays*. Proceedings of the Royal Society of London Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character, Vol. 117, No. 778. (Feb. 1, 1928), pp. 600-609
- [3] Laue, M. V. *The Diffraction of an Electron-Wave at a Single Layer of Atoms*. Phys. Rev. **37**, 53 (1931).
- [4] Martin P. J. , Oldaker B. G. y Miklich, A. H., Pritchard D. E. *Bragg scattering of atoms from a standing light wave*, Phys. Rev. Lett. **60** 515 (1988).
- [5] Simanjuntak Herbert P. y Pereyra Pedro. *Evolution and tunneling time of electron wave packets through a superlattice*. Phys. Rev. B 67, 045301 (2003).
- [6] Peisakhovich Yu. G. y Shtygashev A. A. *Formation of a quasistationary state by Gaussian wave packet scattering on a lattice of N identical delta potentials*. Phys. Rev. B 77, 075327 (2008).
- [7] Horne M., Jex I. y Zeilinger A. *Schrodinger wave functions in strong periodic potentials with applications to atom optics*. Phys. Rev. A, 59(3), 2190 (1999).
- [8] Zhang Shesheng y Pollak Eli. *Monte Carlo Method for Evaluating the Quantum Real Time Propagator*. Phys. Rev. Lett. 91, 190201 (2003).
- [9] van Dijk W. y Toyama F. M. *Accurate numerical solutions of the time-dependent Schrödinger equation*. Phys. Rev. E 75, 036707
- [10] Kosloff R. y Kosloff D. *A Fourier method solution for the time dependent Schrödinger equation: A study of the reaction  $H^+ + H_2$ ,  $D^+ + D_2$ , and  $D^+ + H_2$*  The Journal of Chemical Physics, Volume 79, Issue 4, August 15, 1983, pp.1823-1833.
- [11] Duarte-Zamorano, Roberto Pedro. *Espectroscopia ultrarrápida: preparación y detección de estados moleculares en fases gaseosas y condensadas*. Ph. D. Thesis (Physics), UNAM 2002.
- [12] Greiner W. *Quantum Mechanics: An introduction* (4 ed., Springer, 2001).
- [13] Messiah A. *Quantum Mechanics* (Mineola, New York: Dover, 1999)
- [14] Merzbacher Eugen. *Quantum Mechanics*. Wiley, John & Sons (1998)
- [15] Liboff Richard L. *Introductory Quantum Mechanics*. Addison-Wesley (2002).

- [16] Eisberg Robert y Resnick Robert. *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles* (2nd ed.). Wiley (1985).
- [17] De la Peña, L. *Introducción a la mecánica cuántica*, Ediciones Científicas Universitaria, México, 1990.
- [18] Landau L.D. y Lifshitz E.M., *Quantum mechanics*, Pergamon, Oxford, 1965
- [19] Griffiths David. *Introduction to Quantum Mechanics* (2nd. ed.), Addison Wesley. (2004).
- [20] Arfken G., *Mathematical Methods for Physicists*, Academic Press, 3 Ed, 1990.
- 
- [21] Cohen-Tannoudji C., Diu B. y Laloë F., *Quantum mechanics, Vols. I y II*, John Wiley Inc., N.Y., (1977).
- [22] Informe, en su mayoría, extraído de un trabajo de: Alejandro Fainstein y Karen Hallberg. <http://grupocaos2007.brinkster.net/confina/confinamiento.htm> [Consultado el 5 de junio de 2010]
- [23] Hund F. *Zur Deutung der Molekelspektren III*. Z. Phys. 43, 805. (1927).
- [24] Gamow G. *Zur Quantentheorie des Atomkernes*. Z. Phys. 51, 204. (1928).
- [25] Gurney R. W. y Condon E. U. *Wave Mechanics and Radioactive Disintegration*. Nature (London) 122, 439. (1928).
- [26] Goldberg A., Schey H. y Schwartz J. *Computer-Generated Motion Pictures of One-Dimensional Quantum-Mechanical Transmission and Reflection Phenomena*. American Journal of Physics. Volume 35, Issue 3, pp. 177-186 (1967)-
- [27] Dewdney C. y Hiley B. J. *A Quantum Potential Description of One-Dimensional Time-Dependent Scattering from Square Barriers and Square Wells*. Found. Phys. 12(1), pp. 27-48. (1982).
- [28] Gilary Ido, Moiseyev Nimrod, Rahav Saar y Fishman Shmuel. *Trapping of particles by lasers: the quantum Kapitza pendulum*. J. Phys. A: Math. Gen. 36 L409 (2003).

## Apéndice A. MÉTODO DE FOURIER

### A.1 Método de Fourier para el continuo.

La solución numérica de la Ecuación de Schrödinger desarrollada en el capítulo 2 incluye las derivadas espaciales y las derivadas temporales. La aproximación para la derivada utiliza la propiedad de las transformadas de Fourier de tal manera que una derivada en el dominio espacial, multiplicándola por un factor  $iK_{il}$  se convierte en una derivada en el dominio de la frecuencia, donde  $K_{il}$  es el número de onda correspondiente a la coordenada espacial  $l$ . El operador Laplaciano presente en la ecuación (2.2) es además obtenido ejecutando una transformada de Fourier  $N$ -dimensional en  $\psi^n$  multiplicando el resultado por  $-(K_{i1}^2 + K_{i2}^2 + \dots K_{iN}^2)$  y ejecutando una transformada inversa hacia el dominio espacial. En la parte operativa del método utilizado en este trabajo, y propuesto por R. Kosloff y D. Kosloff, las derivadas espaciales se calculan mediante el empleo de la transformada rápida de Fourier (FFT).

En particular, para el caso unidimensional planteado en la ecuación (2.29) y que le da sustento al trabajo numérico del presente trabajo, podemos explicar lo anterior con más detalle. Para ello recurrimos a las definiciones de la transformada de Fourier y su transformada inversa:

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{ikx} dx \quad (\text{A.1})$$

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) e^{-ikx} dk \quad (\text{A.2})$$

Tomando (A.1) calculamos la derivada de  $f(x)$  con respecto al tiempo:

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{d}{dx} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) e^{-ikx} dk$$

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) \frac{d}{dx} [e^{-ikx}] dk$$

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (-ik) F(k) e^{-ikx} dk$$

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{F}(k) e^{-ikx} dk \quad (\text{A.3})$$

donde

$$\tilde{F}(k) = (-ik)F(k) \quad (\text{A.4})$$

Y así, para la segunda derivada, se tiene que:

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (-ik)^2 F(k) e^{-ikx} dk \quad (\text{A.5})$$

El proceso anterior se puede generalizar de tal forma que, iterando para la  $n$ -ésima derivada, obtenemos la expresión:

$$\frac{d^n f(x)}{dx^n} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (-ik)^n F(k) e^{-ikx} dk \quad (\text{A.6})$$

Por conclusión, diremos que calcular la  $n$ -ésima derivada de  $f(x)$  equivale a multiplicarla por  $(-ik)^n$  en el espacio de Fourier.

## A.2 Transformada de Fourier de una función discreta.

En la mayoría de las situaciones comunes, una función  $h(t)$  se muestrea en intervalos uniformemente espaciados en el tiempo. Sea  $\Delta$  denotado como el intervalo de tiempo entre muestreos consecutivos, de tal manera que la secuencia de los valores muestreados es:

$$h_n = h(n\Delta) \quad n = \dots, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A.7})$$

El recíproco del intervalo de tiempo  $\Delta$  es llamado la tasa de muestreo; si  $\Delta$  es medido en segundos, por ejemplo, entonces la tasa de muestreo es el número de muestreos registrados por Segundo.

### A.3 Teorema del muestreo y el “Aliasing”.

Para cualquier intervalo de muestreo  $\Delta$ , hay también una frecuencia espacial  $f_c$ , llamada la frecuencia crítica de Nyquist, dada por:

$$f_c = \frac{1}{2\Delta} \quad (\text{A.8})$$

Si una onda sinusoidal de la frecuencia crítica de Nyquist es muestreada en su valor de pico positivo, entonces el siguiente muestreo será en su valor negativo del canal, el muestreo después de ello en el pico positivo de nuevo, y así sucesivamente. Expresado de otra manera: el muestreo crítico de una onda sinusoidal son dos puntos muestreados por ciclo. Uno frecuentemente escoge medir tiempo en unidades del intervalo de muestreo  $\Delta$ . En este caso la frecuencia crítica de Nyquist es solo la constante  $\frac{1}{2}$ .

La frecuencia crítica de Nyquist es importante por dos relacionadas, pero distintas, razones. Una representa buenas noticias, y la otra, malas noticias.

Primero las buenas noticias. Es el notable hecho, conocido como el teorema del muestreo: si una función continua  $h(t)$ , muestreada en un intervalo  $\Delta$ , pasa a ser un limitado ancho de banda a frecuencias más pequeñas en magnitud que  $|f_c| = 0$ . Por ejemplo, si  $H(f) = 0$  para todo  $|f_c| = 0$  para todo  $|f| \geq f_c$ , entonces la función  $h(t)$  es completamente determinada por su muestreo  $h_n$ . De hecho,  $h(t)$  está dada explícitamente por la expresión:

$$h_t = \Delta \sum_{n=-\infty}^{+\infty} h_n \frac{\text{sen}[2\pi f_c(t - n\Delta)]}{\pi(t - n\Delta)} \quad (\text{A.9})$$

Esto es un teorema notable por muchas razones, entre ellos si se muestra que la “información contenida” de un ancho de banda limitado de una función es, en algún sentido, infinitamente más pequeño que aquello de una función general continua. Bastante a menudo, uno se está ocupando de una señal que se conozca en los argumentos físicos para ser de anchura de banda limitada (o por lo menos anchura de banda aproximadamente limitada). Por ejemplo, la señal pudo haber pasado a través de un amplificador con una respuesta de frecuencia conocida, finita. En este caso, el teorema del muestreo nos dice que el contenido de información entero de la señal pueda ser registrado muestreándola en una tasa  $\Delta^{-1}$  igual a dos veces la frecuencia máxima pasada por el amplificador (A.8).

Ahora las malas noticias. Las malas noticias se refieren al efecto de muestrear una función continua que no sea anchura de banda limitada menos que la frecuencia crítica de Nyquist. En ese caso, resultan que toda la densidad espectral de la energía que cae fuera del rango de frecuencia  $-f_c < f < f_c$  es espuriamente movida dentro de aquel rango. Este fenómeno se llama “aliasing”. Cualquier componente de la frecuencia fuera de la gama de frecuencia  $(-f_c, f_c)$  es “aliasado” en un rango que se extiende por el mismo acto del muestreo discreto. Usted puede convencerse fácilmente de que dos ondas  $e^{2\pi f_1 t}$  y  $e^{2\pi f_2 t}$  den las mismas muestras en un intervalo  $\Delta$  si y

solamente si  $f_1$  y  $f_2$  difieren por un múltiplo de  $1/\Delta$ , que es justo la anchura en el rango de frecuencia  $(-f_c, f_c)$ .

Hay algo que se puede hacer para quitar el poder del "aliasado" una vez que se ha muestreado discretamente una señal. La manera de superar el "aliasing" es (i) conocer el límite natural de la anchura de banda de la señal - o bien hace cumplir un límite conocido por la filtración análoga de la señal continua, y entonces (ii) muestrear en una tasa suficientemente rápida para dar al menos dos puntos por el ciclo del presente de las más altas frecuencias presentes.

Para sacar lo mejor en esto, podemos tomar el punto de vista alternativo: si una función continua se ha muestreado competente, después, cuando venimos a estimar su transformada de Fourier de las muestras discretas, podemos asumir que su transformada de Fourier es igual a cero fuera del rango de frecuencia entre  $-f_c$  y  $f_c$ . Entonces miramos a la transformada de Fourier para decir si la función continua se ha muestreado competente, en cuyo caso, el efecto del "aliasing" se minimiza. Para logra lo anterior, observamos si la transformada Fourier se está acercando a cero conforme la frecuencia se acerca a por debajo de  $f_c$ , o por arriba de  $-f_c$ . Si, por el contrario, la transformada va hacia un cierto valor finito entonces, las componentes fuera del rango serán "dobladas" hacia dentro del rango critico  $(-f_c, f_c)$ .

#### A.4 Transformada discreta de Fourier.

Estimamos la transformada de Fourier de una función de un número finito de sus puntos muestreados. Suponga que tenemos  $N$  valores consecutivos muestreados:

$$h_k = h(t_k), \quad t_k = k\Delta, \quad k = 0, 1, 2, \dots, N-1 \quad (\text{A.10})$$

De tal manera que el intervalo muestreado es  $\Delta$ . Para simplificar el análisis, supongamos que  $N$  es par.

Si la función  $h(t)$  es distinta a cero solamente en un intervalo finito del tiempo, entonces ese intervalo entero de tiempo es supuesto para estar contenido en el rango de los puntos de  $N$  dados. Alternativamente, si la función  $h(t)$  es continua siempre, entonces los puntos muestreados están supuestos para ser por lo menos "típicos" de qué  $h(t)$  luzca como el resto de las veces.

Con  $N$  números como entrada podremos, evidentemente, producir no más de  $N$  números independientes para la salida. Así pues, en vez de intentar estimar la transformada de Fourier  $H(f)$  en todos los valores de  $f$  en el rango  $-f_c$  a  $f_c$ , busquemos estimaciones solamente en los valores discretos.

$$f_n \equiv \frac{n}{N\Delta}, \quad n = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2} \quad (\text{A.11})$$

Los valores extremos de  $n$  en (A.11) corresponden exactamente a los límites inferior y superior del rango de frecuencia crítica de Nyquist. Si se está realmente atento, usted habrá notado que hay  $N + 1$ , y no  $N$ , valores de  $n$  dentro de (A.11); resultará que los dos valores extremos de  $n$  no son independientes (de hecho son iguales), pero todos los demás sí lo son. Esto reduce el conteo a  $N$ .

El paso restante es aproximar la integral

$$H(f) = \int_{-\infty}^{\infty} h(t)e^{2\pi i f t} dt$$

por una suma discreta, quedando de la forma:

$$H(f_n) = \int_{-\infty}^{\infty} h(t)e^{2\pi i f_n t} dt \approx \sum_{k=0}^{N-1} h_k e^{2\pi i f_n t_k} \Delta = \Delta \sum_{k=0}^{N-1} h_k e^{2\pi i k n / N_k} \quad (\text{A.12})$$

Aquí las ecuaciones (A.10) y (A.11) se han utilizado en la igualdad final. La suma final en la ecuación (A.12) es llamada la transformada de Fourier discreta de los  $N$  puntos  $h_k$ . Denotémosla por  $H_n$ :

$$H_n = \sum_{k=0}^{N-1} h_k e^{2\pi i k n / N_k} \quad (\text{A.13})$$

La transformada discreta de Fourier de Fourier traza los  $N$  números complejos (los  $h_k$ 's) en los  $N$  números complejos (los  $H_k$ 's). No depende de ningún parámetro dimensional, tal como la escala de tiempo  $\Delta$ . La relación (A.12) entre la transformada discreta de Fourier de un sistema de números y sus transformadas continuas de Fourier permite que las muestras de una función continua muestreadas en un intervalo  $\Delta$  se puedan reescribir como:

$$H(f_n) \approx \Delta H_n \quad (\text{A.14})$$

donde  $f_n$  está dada por (A.11).

De ahora en adelante tomaremos la visión de que el índice  $n$  en (A.13) varía de  $-N/2$  a  $N/2$  (ver la ecuación A.11). Puede fácilmente ver, sin embargo, que (A.13) es periódico en  $n$ , con periodo  $N$ . Además  $H_{-n} = H_{N-n}$   $n = 1, 2, \dots$ .

Con esta conversión en mente, generalmente se permite que el índice  $n$  en  $H_n$  varíe de 0 a  $N - 1$  (un periodo completo). Entonces  $n$  y  $k$  (en  $h_k$ ) varían exactamente en el mismo rango, entonces el mapeo de  $N$  números dentro de  $N$  números es manifiesto.

Cuando esta convención es seguida, debemos recordar que la frecuencia cero corresponde a  $n = 0$ , frecuencias positivas  $0 < f < f_c$  que corresponden a los valores  $1 \leq n \leq N/2 - 1$ , mientras que las frecuencias negativas  $-f_c < f < 0$  corresponden a  $N/2 + 1 \leq n \leq N - 1$ . El valor  $n = N/2$  corresponde a ambos  $f = f_c$  y  $f = -f_c$ .

La transformada discreta de Fourier tiene propiedades simétricas casi exactamente como la misma transformada de Fourier continua. La fórmula para la transformada de Fourier inversa, la cual recobra el arreglo  $h_k$ 's exactamente de los  $H_n$ 's es:

$$h_k = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} H_n e^{-2\pi i k n / N} \quad (\text{A.15})$$

Note que las únicas diferencias entre (A.15) y (A.13) son (i) el cambio en el signo de la exponencial, y (ii) la división por  $N$  en el caso de la transformada inversa. Esto significa que una subrutina numérica diseñada para el cálculo de las transformadas discretas de Fourier puede también, con una modificación leve, calcular las transformadas inversas.

La forma discreta del teorema de Parseval es:

$$\sum_{k=0}^{N-1} |h_k|^2 = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} |H_n|^2 \quad (\text{A.16})$$

Hay también análogos discretos a los teoremas de la convolución y de los teoremas de correlación, pero no serán tratados en este trabajo.

## A.5 Transformada Rápida de Fourier (Fast Fourier Transform FFT).

¿Cuánto cómputo está implicado en calcular la transformada discreta de Fourier (A.14) de  $N$  puntos? Por muchos años, hasta mediados de los años sesenta, la respuesta estándar era ésta: Defina  $W$  como el número complejo:

$$W \equiv e^{2\pi i / N} \quad (\text{A.17})$$

Entonces (A.14) puede ser escrito como:

$$H_n = \sum_{k=0}^{N-1} W^{nk} h_k \quad (\text{A.18})$$

Es decir, el vector de los  $h_k$ 's es multiplicado por una matriz en que el  $(n, k)$ -ésimo elemento es la constante  $W$  a la potencia  $n \times k$ . La multiplicación de la matriz produce como resultado un vector cuyas componentes son las  $H_n$ 's.

Esta multiplicación de la matriz requiere evidentemente  $N^2$  multiplicaciones complejas, más un número más pequeño de operaciones para generar las potencias requeridas de  $W$ . Así pues, la transformada de Fourier discreta resulta ser un proceso  $O(N^2)$ .

Lo anterior es engañoso, ya que la transformada de Fourier discreta puede, de hecho, computarse en un número de operaciones del orden de  $N \log_2 N$  mediante el uso de un algoritmo llamado la transformada rápida de Fourier, o FFT (por sus siglas en inglés).

La diferencia entre  $N \log_2 N$  y  $N^2$  es inmensa. Con  $N = 106$  por ejemplo, esta diferencia se da entre 30 segundos de tiempo de CPU y 2 semanas de tiempo de CPU, usando una computadora con una velocidad de procesador de 1MHz.

La existencia de un algoritmo de FFT se volvió generalmente conocida solamente en los mediados de los años sesenta, con el trabajo de Cooley y de Tukey. Retrospectivamente, ahora sabemos que los métodos eficientes para computar la TDF habían sido descubiertos independientemente, y en algunos casos implementados, por una docena de individuos, comenzando con Gauss en 1805.

Un "redescubrimiento" de la FFT, realizado por Danielson y Lanczos en 1942, proporciona una de las derivaciones más claras del algoritmo. Danielson y Lanczos demostraron que una transformada discreta de Fourier de la longitud  $N$  se puede reescribir como la suma de dos transformadas discretas de Fourier, cada una de longitud  $N/2$ . Una de las dos se forma de los puntos pares de longitud  $N$  original, la otra de los puntos con números impares. La prueba es simplemente ésta:

$$\begin{aligned}
 F_k &= \sum_{j=0}^{N-1} e^{2\pi ijk/N} f_j \\
 &= \sum_{j=0}^{N/2-1} e^{2\pi ik(2j)/N} f_{2j} + \sum_{j=0}^{N/2-1} e^{2\pi ik(2j+1)/N} f_{2j+1} \\
 &= \sum_{j=0}^{N/2-1} e^{2\pi ikj(N/2)} f_{2j} + \sum_{j=0}^{N/2-1} e^{2\pi ikj(N/2)} f_{2j+1} \tag{A.19} \\
 &= F_k^e + W^k F_k^0
 \end{aligned}$$

En el renglón anterior,  $W$  es la misma constante compleja que (2.27),  $F_k^e$  denota el componente  $k$ -ésimo de la transformada de Fourier de longitud  $N/2$  compuesta de los componentes impares. Note también que  $k$  en la línea pasada de (A.19) varía de 0 a  $N$ , no a  $N - 2$ . No obstante, las transformaciones  $F_k^e$  y  $F_k^0$  son periódicas en  $k$  con longitud  $N/2$ . Cada una se repite durante dos ciclos para obtener  $F_k$ .

Lo maravilloso sobre el lema de Danielson-Lanczos es que dicha transformada puede ser utilizada recurrentemente. Reduciendo el problema de computar  $F_k$  a aquel de computar  $F_k^e$  y  $F_k^0$  podemos hacer la misma reducción de  $F_k$  al problema de computar la transformada de los datos de entrada  $N/4$  números pares y de los datos con números impares de  $N/4$ . Es decir, podemos definir  $F_k^{ee}$  y  $F_k^{e0}$  para que sea la transformada discreta de Fourier de los puntos que son respectivamente pares-pares y pares-impares en las subdivisiones sucesivas de los datos.