



Dinámica de la densidad de probabilidad en la región interna de un potencial doble delta de Dirac

Dynamics of the probability density in the internal region of a double for a Dirac delta potential

Hernández Maldonado Alberto 

Facultad de Ciencias de la Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Baja California, Unidad Valle de las Palmas, Tijuana, Baja California, México.

Autor de correspondencia: Dr. Alberto Hernández Maldonado, Facultad de Ciencias de la Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Baja California, Unidad Valle de las Palmas, Tijuana, Baja California, México. E-mail: hernandez.alberto@uabc.edu.mx ORCID: 0000-0002-9768-4060.

Recibido: 04 de Septiembre del 2020 **Aceptado:** 25 de Septiembre del 2020 **Publicado:** 30 de Septiembre del 2020

Resumen. - Con base en soluciones analíticas exactas de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, y condiciones iniciales de ondas planas cortadas en el espacio x mediante un obturador cuántico absorbente o reflejante, se analiza el comportamiento dinámico de la densidad de probabilidad electrónica o buildup, en la región interna de un potencial doble delta de Dirac, desde tiempos (dados en vidas medias) muy pequeños, hasta alcanzar la situación estacionaria. Se compara el buildup entre ambos casos, absorbente y reflejante, encontrando que para tiempos cortos el buildup depende de la condición inicial (CI) utilizada, mientras que, para tiempos grandes, es independiente de dicha CI. Usando la CI reflejante, se analiza el buildup desde un tiempo prácticamente cero, hasta que se alcanza la situación estacionaria. Los resultados encontrados pueden ser relevantes en el contexto de la respuesta rápida en los dispositivos conocidos como diodos de tunelaje resonante.

Palabras clave: Transitorios cuánticos; Potencial doble delta; Obturador de Moshinsky.

Abstract. - Based on exact analytical solutions of the time-dependent Schrödinger equation, and initial conditions of plane waves cut in x -space by an absorbing or reflecting quantum shutter, the dynamic behavior of the electronic probability density or buildup is analyzed, in the internal region of a double Dirac delta potential double, from very short times (given in half-lives), until reaching the stationary situation. The buildup is compared between both cases, absorbent and reflective quantum shutter, finding that for short times the buildup depends on the initial condition (IC) used, while for long times, it is independent of said IC. Using the reflecting IC, the buildup is analyzed from practically zero time, until the steady state is reached. The results found may be relevant in the context of rapid response in devices known as resonant tunneling diodes.

Keywords: Quantum transients; Double delta potential; Moshinsky shutter.

1. Introducción

Un modelo útil para estudiar los fenómenos transitorios en la mecánica cuántica, ha sido el llamado *obturador de Moshinsky* [1]. Este modelo se basa en la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo en una dimensión, con la condición inicial de una onda plana confinada a la región $x < 0$, mediante un obturador cuántico situado en la posición $x = 0$. Si al tiempo $t = 0$ se remueve instantáneamente el obturador, el comportamiento de la densidad de probabilidad para $t > 0$ es análogo al obtenido en la difracción de Fresnel de la luz por un semiplano [2], motivo por el cual Moshinsky llamó a dicho fenómeno *difracción en el tiempo*. Dicho modelo ha resultado ser una herramienta útil para estudiar fenómenos físicos reales en otros contextos, entre los que podemos mencionar por ejemplo la *difracción de neutrones* [3-5], entre muchos otros fenómenos que involucran efectos transitorios [6, 7]. La verificación experimental de la difracción en el tiempo [8, 9] ha motivado estudios de fenómenos de *interferencia cuántica*, [10], así como la extensión de la condición inicial del obturador de Moshinsky [11]. Un avance crucial para la exploración de los fenómenos transitorios en estructuras cuánticas unidimensionales, ha sido la extensión del modelo de obturador a situaciones que involucran potenciales. Dicha extensión fue realizada por García-Calderón y Rubio [12] y es válida para potenciales arbitrarios de alcance finito. Este formalismo, así como algunas extensiones del mismo, han permitido estudiar mediante un enfoque

puramente dinámico, la evolución temporal de la densidad de probabilidad en diferentes sistemas cuánticos, así como el estudio del tunelaje cuántico en diversos sistemas que involucran regiones clásicamente prohibidas y pozos de potencial [12-17].

En el presente trabajo, se utiliza el formalismo de estados resonantes desarrollado por García-Calderón y Rubio [12], en el cual se utiliza la condición inicial de obturador absorbente y su extensión con la condición inicial de obturador reflejante [15], para analizar el comportamiento dinámico de la densidad de probabilidad en la región interna de un potencial doble delta de Dirac, desde tiempos muy cortos, hasta alcanzar la situación estacionaria. Se demostrará la ventaja de usar un obturador reflejante en lugar de un absorbente, para estudiar la dinámica de la densidad de probabilidad a tiempos muy cortos, lo cual implica el nacimiento de la densidad de probabilidad o *buildup*. Cabe decir que la física del sistema doble delta es, en buena medida, extensiva a sistemas con perfiles de potencial más complicados.

2. Formalismo

En la figura 1, se muestra en forma esquemática, un obturador de onda plana, confinada a la región $x < 0$, un potencial doble delta de Dirac y un detector. El obturador es removido en forma instantánea en $t = 0$, permitiendo la interacción de la onda con el potencial doble delta, a $t > 0$.

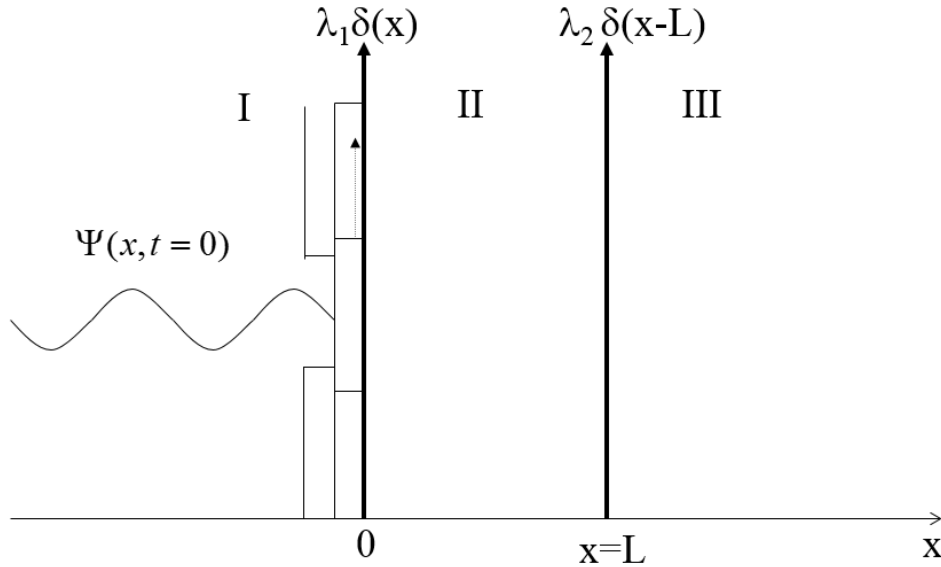


Figura 1. Obturador de onda plana y un potencial doble delta de Dirac.

El objetivo del presente trabajo, es explorar el comportamiento de la densidad de probabilidad en la región interna (*buildup*) en un sistema doble delta, en el régimen de tiempos cortos, hasta alcanzar la situación estacionaria. Los cálculos se realizan con las soluciones de obturador de onda plana, tanto absorbente como reflejante, con el fin de hacer una comparación sistemática de ambas soluciones.

Las soluciones en la región $0 \leq x \leq L$ (ver figura 1) de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, para un potencial arbitrario, con la condición inicial de obturador de onda plana absorbente ($\psi(x, t = 0) = e^{ikx}$) y reflejante ($\psi(x, t = 0) = e^{ikx} - e^{-ikx}$), están dadas respectivamente por [8, 9],

$$\psi_r(x, k, t) = \psi(x, k)M(0, k, t) - \psi^*(x, k)M(0, -k, t) -$$

$$2ik \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{u_n(0)u_n(x)}{k^2 - k_n^2} M(0, k_n, t) + \frac{u_n^*(0)u_n^*(x)}{k^2 + k_n^2} M(0, k_n^*, t) \right], \quad (1)$$

y

$$\psi_a(x, k, t) = \psi(x, k)M(0, k, t) - i \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{u_n(0)u_n(x)}{k - k_n} M(0, k_n, t) + \frac{u_n^*(0)u_n^*(x)}{k + k_n} M(0, k_n^*, t) \right] \quad (2)$$

donde $\psi(x, k)$ es la función de onda estacionaria (ver Ec. 161 de la referencia 18), las funciones $u_n(0)u_n(x)$ están dados por las eigenfunciones resonantes $u_n(x)$ del sistema, las k 's son los

polos del tercer y cuarto cuadrante [18]. El índice n corre sobre los polos complejos k_n distribuidos en el tercer y cuarto cuadrante del plano complejo k .

Las funciones M 's son funciones de Moshinsky, la cual está dada por,

$$M(x, q, t) = \frac{1}{2} e^{i(qx - \hbar q^2 t / 2m)} \operatorname{erfc} \left[\frac{x - \hbar q t / m}{\sqrt{2i\hbar t / m}} \right] \quad (3)$$

donde, q puede tomar los valores de k , $-k$, k_n y k_n^* .

A partir de las Ecs. (1) y (2), es posible describir los fenómenos transitorios que resultan de dichas soluciones, las cuales son válidas para un potencial arbitrario que soporte resonancias, y en este caso, la aplicamos al caso del potencial doble delta de Dirac. Las soluciones antes mencionadas involucran los polos complejos, $E_n = \epsilon_n - i\Gamma_n/2$ y los estados resonantes del sistema, donde ϵ_n y Γ_n son la resonancia y ancho de resonancia del sistema respectivamente.

3.1 Resultados y Discusiones

3.1.1. Dinámica de las densidades de probabilidad para los casos de obturador cuántico absorbente y reflejante.

A continuación, se muestran resultados del comportamiento de la densidad de probabilidad a diferentes tiempos (*buildup*), utilizando la aproximación 200 términos en la sumatoria de la solución, para los casos reflejante y absorbente. Los parámetros utilizados en todos nuestros cálculos a lo largo de este trabajo son: intensidad de las deltas $\lambda_1 = \lambda_2 = 11.5 \text{ eV} - \text{Å}$, separación $L = 50 \text{ Å}$, energía de incidencia igual a la parte real del primer polo o resonancia $E = \epsilon_1 =$

0.1597366 eV . En la figura 2 (a) se muestra el *buildup* para el sistema doble delta. A tiempos relativamente grandes (4τ), el *buildup* tiene el mismo comportamiento que el que se obtiene usando solo un término (no mostrada aquí). Podemos decir que, para tiempos relativamente grandes, la aproximación de un término es suficiente para describir la densidad de probabilidad, tanto para el caso absorbente, como el reflejante. Mientras que para un tiempo menor que $t = 0.5\tau$, el comportamiento de la densidad de probabilidad o *buildup*, para el caso absorbente y reflejante es distinto (ver figura 2 (b)).

Esto es más notorio a distancias y tiempos cortos. Podemos ver que para el caso absorbente de la figura 2 (b), se empieza a formar un pequeño pico, el cual se va haciendo más pronunciado conforme disminuimos el tiempo, como se muestra en las figuras 2 (c-f). Mientras que, para el caso reflejante, representado por la línea punteada, se puede ver que la densidad de probabilidad decrece conforme el tiempo disminuye, hasta ser prácticamente cero, como lo muestra la figura 2 (f); lo cual muestra que, para poder apreciar la densidad de probabilidad desde su nacimiento, es necesario utilizar la condición inicial reflejante, además de considerar más de un término. Esto se puede ver en la figura 2 (f).

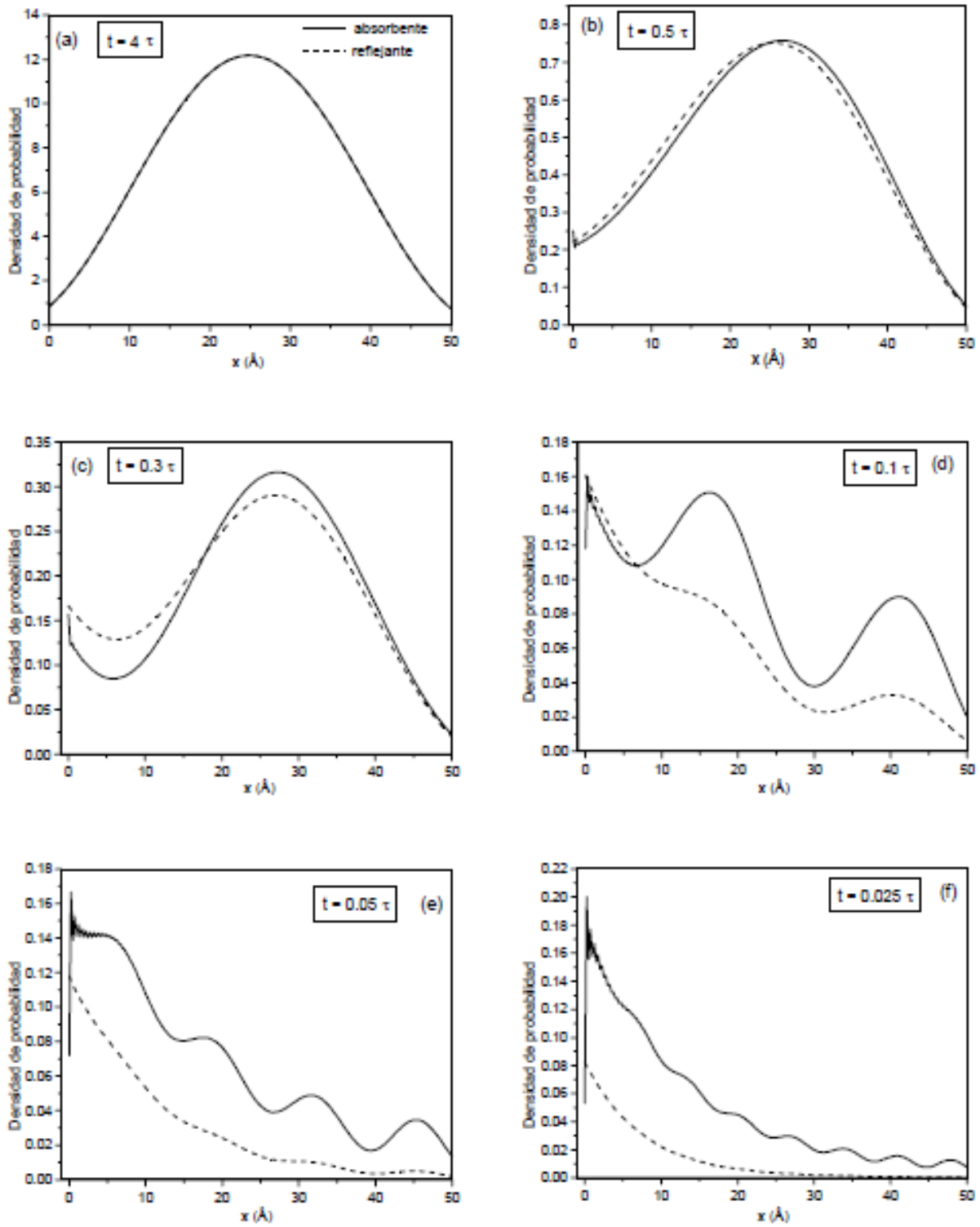


Figura 2. Densidad de probabilidad o *biuldup*, a diferentes tiempos y condiciones iniciales. Condición inicial absorbente (línea continua) y reflejante (línea punteada). Se usaron 200 términos. $\tau = 0.0258667$ ps corresponde al tiempo de vida. Ver parámetros restantes en el texto.

3.1.2. Dinámica de la densidad de probabilidad con la condición inicial de obturador reflejante

A continuación se muestra el comportamiento dinámico de la densidad de probabilidad respecto a la posición, a diferentes tiempos, en la región interna de un potencial doble delta de Dirac, utilizando la condición inicial reflejante, usando 250 polos en la solución de la Ec. (2), y

diferencia del trabajo de la referencia [12] quienes usan una condición inicial absorbente, y en el cual, no es posible analizar el buildup para tiempos arbitrariamente cortos, solo a partir de, aproximadamente 1.7τ , nosotros consideramos tiempos que van desde una cuantas decimas de vidas medias τ , hasta la situación estacionaria, específicamente, un intervalo de tiempos desde 0.0001τ hasta la situación estacionaria.

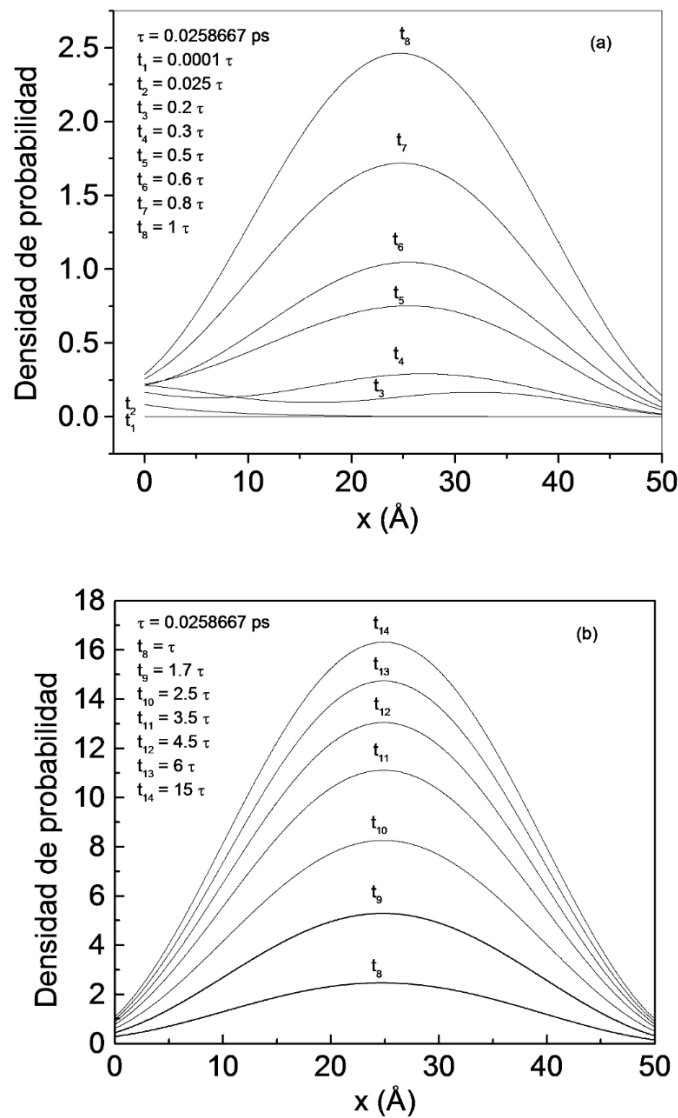


Figura 3. Densidad de probabilidad o *buildup* a diferentes tiempos, usando la condición inicial de obturador reflejante. Se usaron 250 términos en la solución. Los parámetros utilizados son los mismos que los de la figura 2.

En la figura 3 (a) se muestra la densidad de probabilidad en la región interna de un sistema doble delta simétrico, para tiempos cortos (fracciones de τ) que se indican en la figura. Podemos ver que para $t_1 = 0.0001\tau$, la densidad de probabilidad es prácticamente cero, y empieza a crecer conforme el tiempo se incrementa, hasta que finalmente, en $t_8 = \tau$ la densidad de probabilidad es casi simétrica y, podemos decir que su comportamiento es muy similar al caso estacionario, sin embargo, dicho tiempo está todavía muy alejado de la situación estacionaria. La figura 3 (b) es para tiempos de τ en adelante. La situación estacionaria se alcanza aproximadamente en 15τ . Utilizando la condición inicial de obturador de onda plana absorbente, no es posible reproducir la figura 3 (a).

A tiempos grandes (para nuestro ejemplo $t \approx \tau$) el comportamiento de la densidad de probabilidad es independiente de la condición inicial utilizada.

4. Conclusiones

Al comparar el comportamiento de la dinámica de la densidad de probabilidad o buildup, utilizando la condición inicial de obturador absorbente y reflejante, encontramos que a tiempos relativamente grandes, dicho comportamiento no depende de la condición inicial utilizada, sin embargo, a tiempos cortos, el comportamiento del buildup defiere drásticamente, dependiendo de la condición inicial utilizada, siendo incluso imposible observar la formación del buildup desde su nacimiento al usar la condición inicial absorbente. Mientras que, con la condición inicial reflejante, es posible observar el buildup desde su nacimiento hasta la situación estacionaria. Estos resultados demuestran que el efecto de la condición inicial en el comportamiento de la densidad de probabilidad

es relevante a tiempos cortos, y pueden ser útiles en los estudios de dinámica cuántica. También se debe tener cuidado de no atribuir a fenómenos físicos reales, efectos que son en realidad debidos a la condición inicial utilizada [11]. Un estudio más amplio del presente trabajo se puede ver en la referencia 19.

Referencias

- [1] M. Moshinsky, "Diffraction in time". Phys. Rev. Vol. 88, No. 1, 1952. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.88.625>.
- [2] Born, M. E. Wolf. "Principles of optics," Pergamon Press, Inc. Sixty edition. New York, 1959, pp. 808. <https://www.iaa.csic.es/~dani/ebooks/Optics/Principles%20of%20Optics%20-%20M.Born,%20E.%20Wolf.pdf>
- [3] A. S. Gerasimov y M. V. Kazarnovskii, "Possibility of observing nontationary quantum-mechanical effects by means of ultracold neutron," Sov. Phys. JETP, Vol. 44, pp. 892-987, 1976 http://jetp.ac.ru/cgi-bin/dn/e_044_05_0892.pdf.
- [4] R. Gähler, A. G. Klein y A. Zeilinger, "Neutron optical tests of nonlinear wave mechanics", Phys. Rev. A, Vol. 23, pp. 1611-1617, 1981. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.23.1611>.
- [5] J. Felber, R. Gähler, C. Raush y R. Golub, "Matter waves at a vibrating surface: Transition from quantum-mechanical to classical behavior", Phys. Rev. A, Vol. 53, pp. 319-328, 1996. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.53.319>.
- [6] A. del Campo, G. García-Calderón y J.G. Muga, "Quantum transients" Phys. Rep. vol. 476, pp. 1-50, 2009. <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2009.03.002>.
- [7] J. Villavicencio, R. Romo y A. Hernández-Maldonado, "Absorption dynamics and delay time in complex potentials", Phys. Scr. Vol. 93, no. 055201, 2018. <https://orcid.org/0000-0002-2523-6584>.

- [8] P. Szriftgiser, D. Guërey-Odelin, M. Arndt, y J. Dablibard, “Atomic wave diffraction and interference using temporal slits”, Phys. Rev. Lett., vol. 77, no. 1, pp. 4-7, 1996. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.4>.
- [9] T. Hils, J. Felber, R. Gähler, W. Gläaser, R. Golub, K. Habicht, y P. Wille. “Matter-wave optics in the time domain: Results of a cold-neutron experiment”. Phys. Rev. A, Vol. 58, pp. 4784-4790, 1998. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.58.4784>.
- [10] G. García-Calderón y A. Hernández-Maldonado, “Delay time as a quantum transient interference effect”, Physical Review A, Vol. 86, no. 062118, 2012. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.86.062118>.
- [11] A. Hernández, “Delay time in a single barrier for a movable quantum shutter” Phys. Rev. A, Vol. 81, No. 054101, 2010. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.81.054101>.
- [12] G. García-Calderón y A. Rubio. “Transient effects and delay time in the dynamics of resonant tunneling”. Phys Rev. A, Vol. 56, pp. 3361-3370, 1997. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.55.3361>.
- [13] J. Villavicencio y R. Romo., “Dynamical analysis of the buildup process near resonance”, Appl. Phys. Lett., Vol. 77, no. 3, pp. 379-381, 2000. <https://doi.org/10.1063/1.126982>.
- [14] J. Villavicencio y A. Hernández-Maldonado, “Transient quantum beats, Rabi oscillations, and delay time of modulated matter waves”, Phys Rev. A, Vol. 101, no. 042109, 2020. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.101.042109>.
- [15] R. Romo y J. Villavicencio. “Dynamical description of the buildup process in resonant tunneling: evidence of exponential and nonexponential contributions”. Phys. Rev. B Vol. 60: R2142-R2145, 1999. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.60.R2142>.
- [16] R. Romo y J. Villavicencio. “Role of the buildup oscillations on the speed of resonant tunneling diodes”. Appl. Phys. Lett. Vol. 78, pp. 1769-1771, 2001. <https://doi.org/10.1063/1.1354164>.
- [17] R. Romo, J. Villavicencio y G. García-Calderón. “Transient tunneling effects of resonance doublets in triple barrier systems”. Phys. Rev. B, Vol. 66, no. 033108, 2002. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.033108>.
- [18] A. Hernández Maldonado, “Estudio dinámico del retraso temporal en sistemas cuánticos”, Tesis. (CICESE), pp. 119, 2004.
- [19] A. Hernández Maldonado, R. Romo y J. Villavicencio, “Convergence of resonance expansions in quantum wave buildup”, Revista Mexicana de Física, Vol. 62, pp 257–266, 2016. http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0035-001X2016000300257.



Este texto está protegido por una licencia [Creative Commons 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

Usted es libre para Compartir —copiar y redistribuir el material en cualquier medio o formato— y Adaptar el documento —remezclar, transformar y crear a partir del material— para cualquier propósito, incluso para fines comerciales, siempre que cumpla la condición de:

Atribución: Usted debe dar crédito a la obra original de manera adecuada, proporcionar un enlace a la licencia, e indicar si se han realizado cambios. Puede hacerlo en cualquier forma razonable, pero no de forma tal que sugiera que tiene el apoyo del licenciante o lo recibe por el uso que hace de la obra.

[Resumen de licencia - Texto completo de la licencia](#)