

INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL

Escuela Superior de Física y Matemáticas

"Difracción rigurosa del campo de Schrödinger"

TESIS QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE LICENCIADO EN FÍSICA Y MATEMÁTICAS

PRESENTA:

Ivan Heredia de la Cruz

ASESOR DE TESIS

Dr. Jaime Avendaño López



Con mucho cariño dedico este esfuerzo a mi mamá, papá y hermanos.
$Quiero\ agradecer\ a$ mis compañeros de la ESFM y en especial a J. M. Lara Bauche-Alcalde por su
valiosa ayuda en la automatización de los programas de computo. También a mis compañeros del CINVESTAV, quienes siempre me apoyaron y animaron para terminar este trabajo. De verdad agradezco a mis profesores de la ESFM y del CINVESTAV por compartirme su conocimiento y, sobre todo, a mi asesor, Dr. Jaime Avendaño López, quien me ha tenido tanta paciencia y que me ha motivad a seguir adelante en esta hermosa ciencia.

Índice general $\overline{}$

Introducción y objetivos Capítulo 1. Difracción (de la luz a la materia): teoría y experimentos		
		1.1. Interferencia y difracción clásica
1.2. ¿Ondas o partículas?	6	
1.3. Difracción de corpúsculos por rendijas	9	
1.4. La función de estado o función de onda (campo de Schrödinger)	13	
1.5. Más allá de la mecánica cuántica	15	
Capítulo 2. Modelo teórico		
2.1. Dispersión por un potencial	21	
2.2. Solución analítica rigurosa al problema estacionario para una rendija	21	
2.3. Solución analítica al problema estacionario para dos rendijas	35	
Capítulo 3. Resultados numéricos		
3.1. Resultados de una rendija	41	
3.2. Resultados de dos rendijas	51	
Capítulo 4. Comparación con el experimento		
4.1. Una rendija	68	
4.2. Dos rendijas	72	
Conclusiones		
Apéndice A. Algunos Cálculos explícitos		
A.1. Una rendija	76	
A.2. Dos rendijas	80	
Apéndice B. Distribuciones y análisis de Fourier		
B.1. Distribuciones y "función" δ	83	
B.2. Transformación de Fourier	84	
Bibliografía		

Introducción y objetivos

La interferencia de partículas masivas sigue siendo un fenómeno intrigante el cual, en palabras de Richard Feynman [1], "tiene en él el corazón de la mecánica cuántica". "En realidad," escribió, "contiene el único misterio". De hecho, el experimento de interferencia de electrones individuales en una doble rendija de Young (difracción de electrones por rendijas) ha sido catalogado como el experimento más hermoso en (la historia de la) física de acuerdo a la revista Physics World [2] en el año 2002.

La difracción de corpúsculos es un fenómeno fundamental que debe ser discutido amplia y cuidadosamente. Este es nuestro primer objetivo y por ello haremos una pequeña revisión histórica del problema en el capítulo 1. Advertiremos que esta revisión no será del todo cronológica y tampoco del todo completa. Lo primero es porque el estudio cronológico estricto de la difracción podría llevar a confusiones a veces innecesarias; lo segundo, por la cantidad de información acerca del tema y a que solo deseamos tomar lo que nos parece, según a nuestro presente conocimiento, más importante y trascendente. Veremos que la teoría más adecuada (hasta ahora) para describir al fenómeno de difracción de partículas es la mecánica cuántica. La mecánica cuántica ha resultado ser una teoría muy bondadosa y fructífera (responsable del vertiginoso avance científico y tecnológico del siglo pasado y el actual) pero que, sin embargo, ha obligado a la reflexión de nuestros conceptos más básicos e intuitivos, que parecían inapelables hasta hace poco más de cien años, del mismo modo como Einstein demostró con su teoría de la relatividad que debíamos cambiar nuestra concepción del espacio y el tiempo. No es nuestra intención hacer una revisión exhaustiva de la mecánica cuántica porque esto resulta ser una labor colosal, en la que han trabajado los científicos y filósofos más talentosos de éste y el siglo pasado, y que todavía no ha concluido.

El estudio matemático del fenómeno de la difracción de corpúsculos por rendijas es nuestro segundo objetivo y se encuentra en el capítulo 2. Aquí se formula el modelo teórico y se utiliza una metodología rigurosa (sin aproximaciones) para resolver las ecuaciones involucradas para cualquier valor de la longitud de onda de De Broglie respecto al tamaño de las rendijas. Trabajamos en detalle el caso específico de partículas sin espín que inciden sobre una pantalla impenetrable con una o más rendijas. Veremos que la solución está en términos de un sistema matricial infinito.

En el tercer capítulo hacemos uso de estos resultados para obtener patrones de difracción y densidades de probabilidad en el espacio, asignando varios parámetros optogeométricos involucrados en el sistema: ancho, ángulo de incidencia, acercamiento y longitud de onda de De Broglie del haz incidente, así como tamaño y separación de las rendijas. Los cálculos en este capítulo se restringen a longitudes de onda de De Broglie (asociadas a las partículas incidentes) comparables con el tamaño de las rendijas y este caso es, en general, la mayor aportación que se hace en este trabajo.

Finalmente, como tercer y último objetivo nos proponemos discutir con nuestros cálculos algunos resultados de los experimentos (con neutrones) hasta ahora realizados. Esta comparación con el experimento se ha dejado para el cuarto capítulo y sirve para confirmar que la metodología utilizada en este trabajo es adecuada para una extensa gama de valores de los parámetros optogeométricos que caracterizan al sistema.

Debe mencionarse que todos los resultados numéricos se han obtenido utilizando un software elaborado en lenguaje de programación FORTRAN y que involucra la metodología desarrollada aquí. Para los gráficos bidimensionales y tridimensionales se ha utilizado los programas OriginPro 7.5 y Mathematica 5.2, respectivamente.

CAPíTULO 1

Difracción (de la luz a la materia): teoría y experimentos

"En la filosofía verdadera la causa de todos los fenómenos naturales son concebidos en términos mecánicos. Debemos hacer esto, en mi opinión, o renunciar a la esperanza de alguna vez entender cualquier cosa en física."

Christian Huygens (1690)

1.1. Interferencia y difracción clásica

Isaac Newton suponía que los rayos luminosos están compuestos por partículas extraordinariamente diminutas que los cuerpos luminosos arrojan a gran velocidad y que al penetrar al ojo e incidir sobre la retina estimulan la visión. Newton apoyaba estas ideas en el fenómeno de la propagación rectilínea de la luz, pues sólo suponiéndola compuesta por partículas independientes podía imaginar que los rayos de luz pudieran ser separados unos de otros, por ejemplo, por medio de una lente convergente. Otro importante argumento que Newton daba en apoyo a esta idea era que la luz no da la vuelta a cuerpos opacos; o bien, que la sombra geométrica de un cuerpo está limitada por líneas rectas.

El físico inglés Thomas Young en 1815 hacía dos ranuras o rendijas en una lámina opaca y observaba que cuando pasaba luz por ellas se formaba un patrón de imágenes múltiples o patrón de difracción (figura 1.1.1). Como aparentemente este fenómeno¹ no se puede explicar desde el punto de vista de Newton, se entiende la necesidad de describir a la luz como una onda. El primero en explicar el fenómeno de difracción desde el punto de vista de que la luz era una onda (en 1678) fue Christian Huygens, quien expresó la idea intuitiva de que cada punto de un frente de ondas fuera considerado una nueva fuente de ondas esféricas "secundarias" y entonces, un tiempo después, el frente de ondas podría ser encontrado construyendo la "envolvente" de las ondas secundarias [3]. El mismo Young introdujo el concepto de interferencia y explicó la posibilidad, de que bajo condiciones apropiadas, la luz podría sumarse a la luz y producir obscuridad. En 1818, Augustin Jean Fresnel [4] fue capaz de calcular la distribución de luz en los patrones de difracción

 $^{^{1}}$ Grimaldi (1618-1663), físico y astrónomo, llamó a este fenómeno difracción (o división en fracciones).



FIGURA 1.1.1. Patrón de difracción de la luz (blanca) al pasar por dos rendijas. Cerca del centro aparecen varias imágenes brillantes y detalladas.

con precisión excelente, haciendo suposiciones sobre las amplitudes y fases de las fuentes secundarias que sugirió Huygens. Fue hasta 1860 que Maxwell [5] identificó a la luz como una onda electromagnética y que las ideas de Huygens y Fresnel se reconocieron formalmente (matemáticamente) por Gustav Kirchhoff en 1882, como consecuencias lógicas de la naturaleza ondulatoria de la luz. Kirchhoff basó su formulación sobre suposiciones de los valores a la frontera de la luz incidente en la superficie de un obstáculo localizado en la trayectoria de propagación de la luz. Poincaré demostró una década después la inconsistencia de estas dos suposiciones. Sommerfeld modifica en 1896 la teoría eliminando una de las suposiciones de Kirchhoff y haciendo uso de funciones de Green (teoría de difracción de Rayleigh-Sommerfeld).

Es interesante observar cómo un arreglo experimental tan sencillo como lo son las rendijas (de difracción) fue tan importante para cambiar nuestro concepto de la luz, desde un haz rectilíneo de partículas hasta una onda electromagnética.

1.2. ¿Ondas o partículas?

En diciembre 14 de 1900, Max Planck dedujo empíricamente una fórmula que coincidía excelentemente con el espectro de radiación observado en un cuerpo negro. Luego notó que podía obtenerla bajo la suposición de que los osciladores mecánicos cargados de frecuencia ν emiten y absorben radiación solo en cantidades discretas, "cuantos" de energía que son múltiplos enteros de $h\nu$ ($h \simeq 6,6261 \times 10^{-34} \mathrm{J s}$).

En 1905 Einstein retomó el problema del cuerpo negro. Para esas fechas había ya elaborado una teoría que le permitía calcular el comportamiento estadístico de sistemas constituidos por muchos cuerpos, como los gases. Einstein calculó entonces lo que se llaman las fluctuaciones de la energía de la luz [6]. El cálculo le mostró que la fórmula de Planck predecía lo mismo que la de Rayleigh (resultado clásico que no explicaba correctamente los espectros de radiación del cuerpo negro), pero con un término adicional a las fluctuaciones, no predicho por la física clásica, igual al de las fluctuaciones de la energía de un gas diluido, ya estudiado por él. Esto sugería que en el campo electromagnético existen componentes similares a las moléculas de un gas con energía bien definida $h\nu$. A estas "moléculas" electromagnéticas, G. N. Lewis les llamó fotones en 1926. Einstein pudo demostrar que la distribución de Planck es consistente sólo con la hipótesis de que si un átomo absorbe la energía $h\nu$, entonces se transfiere siempre a él un momento $h\nu/c$ en la dirección de propagación. Einstein resuelve inmediatamente el efecto fotoeléctrico² con su concepción fotónica de la luz y cuyas predicciones fueron comprobadas por Millikan entre los años 1914 y 1916 [7]. De igual forma la teoría de Einstein explica satisfactoriamente el efecto Compton³.

La idea del cuanto de Einstein fue muy controvertida pues parecía contradecir a las ecuaciones de Maxwell, que describen la energía de radiación como una función continua del espacio y tiempo. Pero Einstein consideraba que las mediciones en óptica envolvían solo promedios temporales, y era concebible que la teoría de Maxwell podría ser insuficiente siempre que tomaran lugar procesos cuasi-instantáneos [6]. Einstein presintió que debería conservar las ondas luminosas y establecer entre éstas y los fotones una especie de correspondencia estadística.

Un experimento sencillo que muestra la naturaleza granular de la luz consiste simplemente en tomar fotografías de un objeto a diferentes grados de exposición de la película, desde uno muy bajo hasta el adecuado para obtener una buena foto; la película se va imprimiendo por puntos, como si la luz estuviera formada por gránulos o corpúsculos que llegan a ella separadamente y van dejando marcas individuales

²Hertz observó en 1887 que si la luz incidía en un metal (alcalino), éste emite electrones. Este fenómeno, llamado efecto fotoeléctrico, pronto condujo a resultados paradójicos con los puntos de vista de las teorías clásicas.

 $^{^3}$ Compton observó (1921-1923) que rayos γ con frecuencia ν_0 emitidos por molibdeno y dispersados por grafito poseían una frecuencia específica ν (después de la supuesta colisión) menor que ν_0 y que la diferencia $\nu - \nu_0$ dependía del ángulo de dispersión. Esto no se podía explicar de manera satisfactoria clásicamente.

en la película (vea [4] sección IX). Un resultado parecido se obtiene advirtiendo cómo se forma la imagen de una estrella con una cámara sobre una placa fotográfica. Después de todo, Newton no estaba del todo equivocado.

En 1906 Einstein volvió a aplicar la idea de la cuantización a los átomos que forman un cuerpo sólido, calculando el calor específico de un sólido⁴. De nuevo los resultados de Einstein fueron exitosos. Este trabajo de Einstein es importante porque permitió ver que el fenómeno de la cuantización es una propiedad general de la naturaleza y ya desde 1909, para un congreso en Salzburgo [8], dejaba ver, el primero entre todos, que la descripción cuántica de la luz debería contener simultáneamente aspectos corpusculares y ondulatorios⁵.

Entre 1912 y 1914, Niels Bohr trató de encontrar un modelo consistente para la estructura atómica [7], dirigida a reconciliar el principio combinatorio de Ritz⁶ (1908) de la líneas espectrales, el modelo atómico de Rutherford (quien había descubierto la existencia del núcleo en 1911) y los cuantos de Planck y Einstein. Bohr asumió que la energía de sistemas atómicos y moleculares podrían solo tener valores discretos⁷, y la emisión y la absorción de luz por estos sistemas solo pueden presentarse a frecuencias fijas $\nu_{if} = |E_i - E_f|/h$, donde E_i y E_f son las energías del sistema antes y después de la emisión (o la absorción). Bohr se enteró en 1913 de la fórmula empírica de Balmer (que describían muy bien las líneas visibles del espectro de emisión del Hidrógeno), y en tan solo unas semanas encontró la regla para la cuantización de la energía y desarrolló su modelo del átomo de Hidrógeno.

Parecía ser que los electrones y otros corpúsculos materiales no seguían las leyes de la mecánica clásica, como se creía hasta entonces, sino que únicamente pueden tener ciertos estados de movimiento, los estados estacionarios de Bohr, en los cuales se satisfacen ciertas "condiciones cuánticas" en donde de nuevo figuran la constante h y números enteros (números cuánticos). Estos números enteros son importantes pues aparecen con frecuencia en la teoría ondulatoria, por ejemplo en los cálculos de interferencia y difracción, lo que se puede percibir como una indicación en favor a la hipótesis de Einstein.

El joven físico francés Louis De Broglie le dio forma a estas ideas en su tesis doctoral de 1924. Propuso la idea de que a toda partícula en movimiento con momento lineal p (= $masa \times velocidad de la partícula$), se le asociara una onda en propagación con longitud de onda λ , llamada longitud de onda de De Broglie, y dio una fórmula para hacerlo:

$$\lambda = h/p.$$

De Broglie dedujo esta relación pensando que era necesario introducir al mismo tiempo la concepción corpuscular y la concepción ondulatoria. En sus palabras [9], "se tiene que suponer la existencia de corpúsculos acompañados por ondas". Teniendo en mente esa concepción, a un corpúsculo aislado e inmóvil en un sistema coordenado le asocia una onda estacionaria con la misma fase en cada punto. Bajo argumentos

⁴El calor específico es una propiedad que depende del material del que está hecho y determina cuánto aumenta su temperatura cuando le suministramos una cantidad fija de calor al cuerpo.

⁵A. Pais resume (citando frases de Einstein [8]) los puntos de vista de Einstein sobre la teoría de la radiación en 1909: "
... es en mi opinión que la siguiente fase del desarrollo de la física teórica nos brindará una teoría de la luz que puede ser interpretada como una clase de fusión de la teoría ondulatoria y de la teoría de emisión ... [la] estructura de onda y [la] estructura cuántica ... no serán consideradas como mutuamente incompatibles ..."

⁶El principio combinatorio de Ritz establece que la frecuencia que cada línea espectral ($\omega=2\pi\nu=kc$) de cualquier elemento puede expresarse como la diferencia de dos términos espectrales, cada uno de los cuales contiene un número entero.

⁷La primer evidencia directa de los niveles de energía discretos en los átomos fue proporcionada por Franck y Hertz en 1914. En su experimento, los electrones emitidos de un cátodo caliente eran acelerados a través de un gas de Hg por medio de un potencial ajustable entre el ánodo y el cátodo. Encontraron que la corriente como función del voltaje no incrementaba monótonamente, sino que aparecían una serie de picos en múltiplos (enteros) de 4.9 Volts.

relativistas, ve cómo se comporta la onda en otro sistema inercial⁸ y encuentra que necesariamente, bajo la premisa de que $E = h\nu = \gamma m_0 c^2$, se debe cumplir (1.2.1). De Broglie obtiene la misma relación para el caso en que el corpúsculo se encuentra bajo la acción de un fuerza constante. Después de deducir su famosa fórmula, la preocupación de De Broglie era cómo hacer corresponder con la onda el hecho de que el corpúsculo esté localizado, de que tenga una posición en el espacio, ya que la onda plana monocromática que propuso tiene la misma amplitud en todo punto del espacio. Luego, no había forma de definir un punto privilegiado, que sería la posición del corpúsculo en cada punto. De Broglie meditaba en aquella época [10] que sólo la fase de la onda tenía un sentido físico verdadero y no su amplitud la cual, consideraba, tenía sólo un sentido probabilístico. Este punto fue recalcado por él al asignarle a la onda asociada a la partícula el nombre de "onda de fase".

Cabe mencionar que en 1925 Einstein preparó un trabajo, estimulado por las observaciones del físico indio Satyendra Bose, en el cual se muestra que sistemas cuánticos, como los gases, no deben describirse usando métodos estadísticos clásicos (los de Maxwell y Boltzmann), sino con la ayuda de una nueva estadística de tipo cuántico (y que hoy se llama de Bose-Einstein). Einstein regresó a sus viejos métodos de las fluctuaciones y encontró que para obtener los resultados correctos, a las fluctuaciones de la energía producidas por el movimiento de las moléculas del gas tenía una vez más que agregar un término adicional idéntico al producido por la interferencia de ondas clásicas como la luz. Así, tanto para la descripción del campo electromagnético, como para la de las moléculas, se requieren simultáneamente términos corpusculares y ondulatorios. Einstein menciona que ha conocido en esos días una proposición análoga de un joven físico francés (De Broglie) y sugiere que este fenómeno ondulatorio (de las moléculas) se podría observar mediante fenómenos de difracción.

Con las ideas de Einstein y de De Broglie parecía claro por ejemplo que el electrón podría manifestar propiedades ondulatorias, digamos fenómenos de interferencia y difracción. Esto se comprobó experimentalmente cuando, en 1927, C. J. Davisson y L. H. Germer, incidieron electrones con una energía de alrededor 54 eV (longitud de onda de De Broglie de 0.17 nm) que fueron difractados por un arreglo regular de átomos en la superficie de un cristal de níquel. G. P. Thompson, independientemente y un mes después, hace pasar electrones con energía de alrededor de 40 keV (longitud de onda de 0.006 nm) a través de hojas de mica delgadas. Estos experimentos probaron que los electrones se comportan como ondas (de luz), en el sentido de que la forma en que se distribuían los electrones, después de pasar por el material, era como la del patrón de difracción de luz con longitud de onda dada por la relación de De Broglie (1.2.1)9. Habría confirmación experimental de que el mismo fenómeno sucedía con haces de átomos de He y de moléculas de H₂ por Estermann, Frisch y Stern (1930-1931), y con neutrones por Mitchell y Powers en 1936 (también por Fermi y Marshall en 1947). Los resultados para los átomos de He y moléculas de H₂ son significativos pues demuestran que el fenómeno de difracción de partículas no sucede sólo para partículas elementales. Estos experimentos prueban que la longitud de onda de cada uno de estos sistemas compuestos (He o H₂) es $\lambda = h/\sum_i M_i v_i$, donde M_i y v_i son la masa y la velocidad (pequeña comparada con la velocidad de la luz) de las partículas elementales que los constituyen. Note que esto no parece estar de acuerdo con la idea de que cada constituyente del sistema tenga asociada una onda física real con longitud de onda $\lambda_i = h/M_i v_i$, pues debería poderse observar en el patrón de difracción.

⁸De Broglie afirma en ese momento que la velocidad de grupo de las ondas en este sistema inercial es igual a la velocidad de la partícula en ese sistema.

⁹La difracción de electrones en materiales es una herramienta comúnmente usada en la investigación industrial. En particular, es usada para estudiar propiedades de materiales y superficies: corrosión, catálisis y reacciones químicas, dislocaciones, etc. Los físicos de materiales o del estado sólido suelen utilizar electrones de alta energía para monitorear el crecimiento, por ejemplo, de semiconductores (RHEED) con la famosa técnica de Epitaxia por Haces Moleculares (MBE) [11].

En 1925 (el joven físico) Werner Heisenberg propone una teoría de la mecánica basada en matrices (aunque él nunca había oído hablar de matrices) que fue desarrollada de inmediato por Max Born y su joven asistente, el matemático Pascual Jordan. Paralelamente Erwin Schrödinger desarrolla otra dirección independiente de investigación, surgida de la proposición de De Broglie y Einstein. Su esfuerzo culminó en 1926 con una versión diferente, pero equivalente a la anterior, de la mecánica cuántica y que involucraba una ecuación, que explícitamente introduce la relación de De Broglie $\lambda = h/p$, y que sintetiza el conocimiento sobre el comportamiento de los sistemas atómicos acumulado hasta esas fechas¹⁰. La ecuación de Schrödinger describe la dinámica de la onda de De Broglie más general, función de estado o función de onda $\Psi(\overrightarrow{r},t)$, bajo cualquier potencial escalar $V(\overrightarrow{r})$ sobre una partícula (sin espín):

$$(1.2.2) \qquad \qquad \hat{H}\Psi(\overrightarrow{r},t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(\overrightarrow{r},t),$$

donde $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\overrightarrow{r})$ es el operador hamiltoniano y $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ el operador momento.

Había surgido la mecánica cuántica. No obstante, la preocupación de De Broglie sobre el significado de la onda asociada a la partícula y sus consecuencias seguiría vigente por mucho tiempo (hasta la fecha es un tema de discusión). Parte de la respuesta se encuentra en los experimentos de mayor grado de simplicidad conceptual: la interferencia y difracción de corpúsculos.

1.3. Difracción de corpúsculos por rendijas

Durante el examen doctoral de De Broglie, él afirma como respuesta a una pregunta de Perrin que debería mostrarse la posible existencia de ondas físicas mediante el experimento de difracción de electrones. Para De Broglie la fase de las ondas asociadas al movimiento corpuscular poseen un carácter físico. Los experimentos de Davisson y Germer, y los de Thompson confirmaban que habían situaciones en las cuales los electrones se comportan en forma análoga a como lo harían los rayos X. Los experimentos con átomos y moléculas de Estermann, Frisch y Stern apoyaban esta situación pero dejaban ver que la existencia de una onda física real asociada a cada corpúsculo podría no ser correcta.¹¹.

Queda la cuestión de cómo interpretar el fenómeno ondulatorio asociado al movimiento de corpúsculos. ¿Ondas de qué? Para intentar una respuesta tenemos que recurrir a los experimentos de mayor grado de simplicidad conceptual: los de *interferencia* y difracción. Analicemos el siguiente experimento puramente conceptual (Gendakenexperiment). Un aparato lanza partículas hacia una placa que tiene una rendija y detrás de ésta hay una pantalla que registra cómo son dispersadas. Vamos a suponer que todas las partículas son lanzadas en la misma dirección y velocidad formando un haz poco denso. Podemos esperar una distribución de partículas transmitidas casi rectangular ya que sólo los bordes de la ranura desvían a las partículas y no la cavidad de la ranura. Lo mismo podríamos esperar con dos o más rendijas (vea la figura 1.3.1). Tapar una rendija solo hará que dejemos de ver el manchón rectangular correspondiente. Ésto es lo que pasa clásicamente con corpúsculos de dimensiones macroscópicas. Sin embargo, no podemos esperar lo

 $^{^{10}}$ Fueron los esfuerzos de Dirac (1925-1926) y Neumann (1932) los que dieron una estructura matemática formal y elegante a la mecánica cuántica y que es usada actualmente en los cursos avanzados.

 $^{^{11}}$ Actualmente no se refuta el hecho de que haya una propiedad ondulatoria asociada al movimiento de todo corpúsculo y, de hecho, es base del gran desarrollo electrónico de los últimos 50 años. Por ejemplo, en los microscopios electrónicos o protónicos se logran amplificaciones del orden 10^3 veces mayores que los microscopios ópticos, manejando a los corpúsculos como un haz de ondas con longitud de onda de De Broglie. Sin embargo, que la solución a la ecuación de Schrödinger Ψ para una partícula sea la de una onda no es motivo para interpretarla como una onda física en el espacio ordinario. Cuando se resuelve la ecuación para la dinámica de n partículas, la solución es una "función de onda" en un espacio de configuración abstracto de 3n dimensiones y no n ondas interaccionando en el espacio ordinario de configuración. Citando a Ballentine [12], "la mal interpretación de Ψ como una onda física en el espacio ordinario es posible solo porque la mayoría de las aplicaciones comunes de la mecánica cuántica son de estados de una partícula, para las que el espacio de configuración y el espacio ordinario son isomorfos".

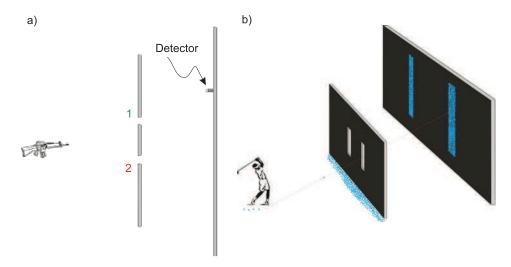


FIGURA 1.3.1. a) Experimento gendaken de la doble rendija con partículas. b) Resultado esperado clásicamente.

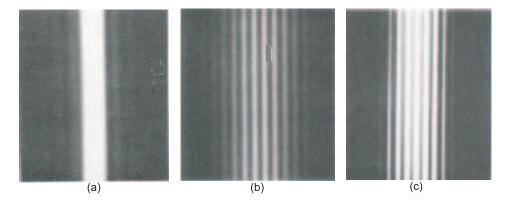


FIGURA 1.3.2. Patrones de difracción de electrones obtenidos por Claus Jönsson [13]. a) Una rendija, b) dos rendijas y c) tres rendijas.

mismo cuando las partículas implicadas en el experimento son electrones, según hemos visto. La pantalla que registra a los electrones podría ser por ejemplo una película fotográfica. La predicción de la mecánica cuántica, como veremos luego, son distribuciones de los electrones transmitidos como las de la figura 1.3.2. Se observa un máximo central en las distribuciones y una serie de máximos (y mínimos) secundarios que exceden visiblemente el número de rendijas. Si tuviésemos más rendijas se debería esperar una distribución todavía más complicada pero muy parecida a la que se formaría usando luz monocromática, en donde las ondas provenientes de cada rendija se superponen (interfieren) sobre la pantalla y crean el patrón de difracción. Aunque las ondas pueden interferir constructiva o destructivamente por tener fases diferentes es más difícil pensar en la interferencia destructiva de corpúsculos (disminuir el número de corpúsculos agregando otros). La comprobación experimental de que existen tales patrones de difracción estuvo a cargo del alemán C. Jönsson hasta 1961 [13]. Brevemente comentamos el experimento.

C. Jönsson supera dificultades técnicas que no tomamos en cuenta durante nuestro experimento gendaken. Había que tomar en cuenta que la longitud de onda del haz de electrones debía ser muy pequeña para obtener resultados razonables. Jönsson trabajó con electrones acelerados por un potencial de 50 kV

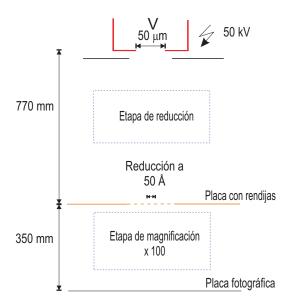


FIGURA 1.3.3. Aparato de difracción de electrones de Jönsson [13].

que corresponden a una longitud de onda de De Broglie de 0.05 Å¹². Habría que construir rendijas con dimensiones más pequeñas que un átomo, fundamentalmente imposibles de realizar en cualquier material sólido. Para contrarrestar esta limitación (pues Jönsson logró solamente crear rendijas de alrededor de 1μ m) se tendría que lograr una iluminación perfectamente coherente¹³ e intensa y una buena amplificación de los patrones de interferencia muy finos. Su arreglo experimental se muestra en la figura 1.3.3. Debió de eliminar las perturbaciones magnéticas debidas a las fluctuaciones en el voltaje. Algunos de sus resultados se muestran en la figura 1.3.2.

¿Cómo puede la perspectiva de los electrones como partículas justificar éstos patrones de difracción? Antes este mismo experimento se había usado para descartar que la luz era un corpúsculo. Ahora estamos hablando de electrones que son corpúsculos y el experimento sugiere un comportamiento ondulatorio. Se podría argüir que los electrones son como las moléculas de H₂O del agua que en conjunto y en gran número pueden llegar a comportase ondulatoriamente. Es decir, podemos decir que el fenómeno es de tipo cooperativo. Sin embargo, la realidad es diferente. Podemos hacer la intensidad de nuestro haz muy baja de forma tal que se emita un electrón a la vez y que el tiempo entre emisiones sea suficiente para que cada electrón llegue independientemente a la pantalla¹⁴. Como veremos en las próximas secciones, la mecánica cuántica predice que habrán patrones de difracción en esta situación para cualquier número de rendijas. Esta versión del experimento fue realizada por primera vez en Bolonia (en italiano, Bologna) por

 $^{^{12}}$ Para deducir la longitud de onda de De Broglie λ del electrón en el haz a partir del voltaje V se utiliza la expresión relativista de la conservación de la energía $mc^2/\sqrt{1-(v/c)^2}-mc^2=eV$ y el momento relativista $p=mv/\sqrt{1-(v/c)^2}=h/\lambda$ y obtenemos directamente que $\lambda=\lambda_C/\sqrt{(1+eV/mc^2)^2-1}$, donde $\lambda_C=h/mc$ (longitud de onda de Compton), m la masa del electrón, c la velocidad de la luz y e la carga del electrón.

 $^{^{13}}$ Para la luz visible la condición de coherencia angular se satisface normalmente si $a\alpha \ll \lambda$ donde a es el ancho del área a iluminar y α el ángulo de abertura (ángulo subtendido por la fuente de iluminación en el plano de las rendijas). Esto no es ningún reto para luz visible pero sí para las longitudes de onda de los electrones. Como no podemos hacer las rendijas tan pequeñas debemos hacer α lo más pequeño posible.

¹⁴La versión de este experimento con fotones fue realizada por L. Biberman y colaboradores en la URSS en 1949, L. Jánossy y colaboradores en Hungría en 1958, R. L. Pfleegor y L. Mandel en Estados Unidos en 1967, entre otros. Sin embargo, desde 1909 Geoffrey Ingram Taylor [14] ya había realizado un experimento en el cual mostraba que aún con una luz equivalente a "una vela prendida a una distancia mayor a una milla" se podían formar franjas de interferencia. Esto llevó a Dirac [15] a decir su famosa frase de que "luego, cada fotón interfiere sólo con el mismo".

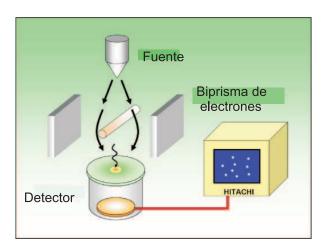


FIGURA 1.3.4. Bosquejo simple de un biprisma de electrones e interferencia de electrones saliendo de una fuente muy débil.

O. Donati, G. F. Missiroli y G. Pozzi [16] en 1972 (y P. G. Merli [17] en 1974) utilizando un biprisma de electrones que hace las veces de una doble rendija¹⁵ (con la ventaja de que simplifica el fenómeno a interferencia pura). Un biprisma esencialmente es un cable conductor muy delgado en ángulo recto con el haz de electrones que divide a éste último en dos componentes y que permite observar interferencia entre ellos (vea figura 1.3.4). Sin quitarle crédito a los autores de este experimento, hemos decidido mejor presentar resultados más recientes de 1989 [19] de Akira Tonomura y colaboradores del Laboratorio de Investigaciones Avanzadas Hitachi en Tokio debido a la claridad de sus fotografías¹⁶.

En Hitachi utilizan un microscopio electrónico de emisión de campo equipado con un biprisma y un sistema contador sensible a la posición de los electrones. Los electrones se emiten de un filamento de Tungsteno por un voltaje de alrededor de 3-5 kV, y son acelerados posteriormente a través de un potencial de 50 kV. Después de que los electrones se dividen por el biprisma de electrones, las dos componentes del haz de electrones se recombinan en el plano de observación, donde el patrón de interferencia se graba en vídeo. Sus resultados se sintetizan en la figura 1.3.5.

Para darse una idea de la velocidad a la que viajan los electrones (\sim 0.41 de la velocidad de la luz), ellos pueden dar tres vueltas alrededor de la tierra en un segundo. Como se observa de la figura 1.3.5, Hitachi afirma en 2006 en su página web que puede emitir menos de 10 electrones por segundo. En su artículo original de 1989, los electrones arribaban a la razón de 1000 por segundo, que equivadría, por recorrer una distancia de 1.5 m en el microscopio, a un intervalo medio entre electrones sucesivos de 120 km (si no hubiese obstáculo en su camino). Actualmente Hitachi ha separado a los electrones en casi 3 ordenes de magnitud más.

Aceptando que los electrones individuales fuesen ondas físicas reales (aún cuando nunca ha sido así, pues siempre se detectan como objetos puntuales con carga, masa y espín fijos), para que exista interferencia se debería tener que al menos dos electrones pasen por ambos lados del biprisma de electrones simultáneamente. Sin embargo, como hemos visto, esto nunca puede ocurrir puesto que ¡sólo hay un electrón en el microscopio a la vez!, 10 por segundo. Como vemos, es improbable que exista un fenómeno

¹⁵Ya en 1954, Gottfried Möllensted y Heinrich Dücker de la Universidad de Tübingen en Alemania, habían desarrollado y utilizado el biprisma de electrones como un análogo al biprisma de Fresnel para generar franjas de interferencia por un haz de electrones [18].

¹⁶ De hecho, Hitachi muestra en el enlace http://www.hqrd.hitachi.co.jp/em/movie/doubleslite-n.wmv la grabación de la formación de las franjas de interferencia en su experimento.

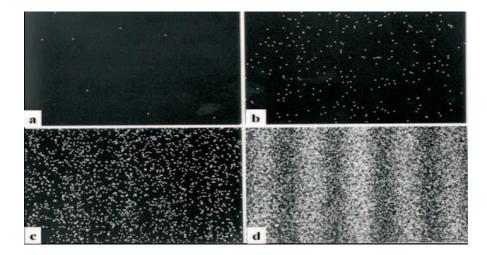


FIGURA 1.3.5. Evolución en el tiempo del patrón de interferencia de electrones. El número de electrones acumulados en la pantalla son a) 8 electrones; (b) 270 electrones; (c) 2000 electrones; (d) 6000 electrones. El tiempo de exposición desde el principio a la etapa (d) es de 20 min. (fotografía en http://www.hqrd.hitachi.co.jp/em/doubleslit-f2.cfm)

cooperativo de cualquier tipo en los electrones del haz bajo estas circunstancias como para generar tal patrón de interferencia¹⁷. Hoy por hoy, este fenómeno extraño de tipo ondulatorio ha sido demostrado no solo para electrones, sino para neutrones [21], átomos [22, 23] y moléculas tan grandes como Carbono-60 [24] y Carbono-70 [25]. Sobre los neutrones y átomos hablaremos en la próxima sección.

1.4. La función de estado o función de onda (campo de Schrödinger)

De los resultados de Hitachi podemos observar dos cosas. La primera es que aunque se hace la misma preparación de los electrones (emisión, aceleración, colimación, etc.), éstos llegan por lo general a un lugar diferente e impredecible en la pantalla; en otras palabras, una preparación específica (del objeto a medir) no determina el resultado de las mediciones subsecuentes (así como dos resultados iguales no implican que el objeto medido se haya preparado igual). Esta observación de cómo se comporta la naturaleza es la que no esperaríamos clásicamente. Aquí se encuentra el misterio del que hablaba Feynman, ¿qué hace que los electrones se comporten tan azarosamente?

Lo segundo que podemos observar es que en la pantalla se forma una distribución bien definida de la llegada de los electrones parecida a la de un patrón de interferencia por luz. Por otro lado, al resolver la ecuación de Schrödinger para este problema (nosotros lo haremos estrictamente en el próximo capítulo para el caso de difracción de partículas por una y dos rendijas) se determina que la solución (función de onda) resulta ser precisamente la misma que describe a ondas de luz interfiriendo, que es muy grande en magnitud en ciertas regiones y despreciable en otras, tal como sucede con la distribución de electrones en la pantalla; donde la función de onda es de mayor amplitud hay más electrones y menos donde la amplitud es menor. Max Born sería el primero en postular (1926) que precisamente, la probabilidad de

 $^{^{17}}$ Se podría representar a cada electrón por un paquete de ondas, de forma que cada electrón no sea perfectamente monoenergético o no tenga una longitud de onda bien definida (así como en óptica existe luz no monocromática). Por la relación de incertidumbre, el paquete de ondas asociado a cada electrón tendría una distancia longitudinal de coherencia l_c y una distancia transversal de coherencia l_t . ¿Podría ser esta la causa de la interferencia entre electrones? La respuesta es un rotundo no de Silverman [20] quien hace los cálculos en base al experimento Hitachi de 1989 y encuentra que $l_c \sim 7.9 \times 10^{-5} {\rm cm}$ (despreciable ante los 120 km de separación efectiva entre electrones), y $l_t \sim 140 \mu {\rm m}$. Luego, no hay porque abandonar el concepto de partícula monoenergética como sugieren innumerables autores.

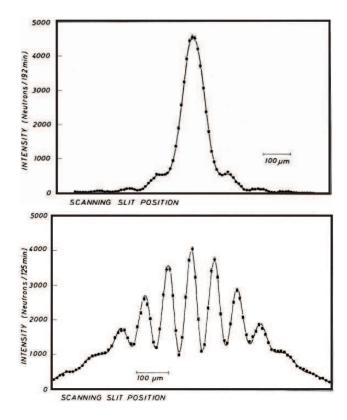


FIGURA 1.4.1. Patrón de difracción de neutrones de longitud de onda de De Broglie promedio 19.26 y 18.45 Å, pasando por una (93 μ m) y dos (21.9 [rendija 1] - 104.1 [separación] - 22.5 [rendija 2] μ m) rendijas, respectivamente. Las curvas sólidas representan las predicciones teóricas por primeros principios, de acuerdo con Zeilinger y Gähler [21].

que los electrones lleguen a una región dada (\overrightarrow{r},t) del espacio y del tiempo está determinada por el cuadrado de la amplitud que tiene la función de estado en esa región del espacio y del tiempo: $|\Psi(\overrightarrow{r},t)|^2$. Una comprobación experimental precisa de esta afirmación es la difracción de neutrones.

La difracción de neutrones es muy importante pues, a comparación de los experimentos con electrones, se obtiene una mejor precisión por su neutralidad eléctrica y lo pequeño de su momento magnético (pues los aparatos no afectan tanto a los neutrones). Los experimentos de difracción de neutrones por rendijas se habían realizado ya desde 1969 con resultados que comprobaban la teoría cualitativamente hasta semicuantitativamente (lo mismo con otras clases de partículas)¹⁸. Esto motivó a Zeilinger y Gähler en 1988 [21] a medir los patrones de difracción de neutrones fríos ($\lambda \approx 2$ nm) en rendijas simples y dobles de dimensiones de 20 a 100 μ m con resultados que han confirmado con mucha precisión las predicciones cuánticas (vea figura 1.4.1). Algunos detalles interesantes en su experimento es que la fuente emite 1 neutrón cada 2 s, y el tiempo necesario para que cada neutrón recorra el aparato de medición es de tan solo 0.1 s. Los neutrones transmitidos se cuentan moviendo en pasos (lateralmente al haz) una rendija de escaneo, o "scanning slit", a través del plano de observación.

De las observaciones concluimos, pues, que una preparación específica no determina el resultado de las mediciones subsecuentes, sino sólo la probabilidad de los resultados posibles. De forma que los

¹⁸ Inicialmente los experimentos con neutrones tenían limitaciones técnicas por las fuentes que los emitían. Los llamados neutrones térmicos con longitud de onda de alrededor de 1Å no podían analizarse con tanta precisión como se hace ahora con los llamados neutrones muy fríos, con mayor longitud de onda.

electrones no dejan de ser "partículas", no obstante, la función de estado que describe un *ensemble*¹⁹ de ellos preparados idénticamente, sí tiene un comportamiento ondulatorio. A cualquier proceso repetible que lleve a probabilidades bien definidas para todos los observables (un observable es una variable dinámica que puede, en principio, ser medida) se le llama un "procedimiento de preparación de estado" o simplemente "estado" y, por axioma, le corresponderá una función de estado (o en el caso más general, un operador de densidad).

Finalmente, y como habíamos mencionado, el experimento de la doble rendija se ha llevado también a cabo utilizando átomos de He [22] (más recientes y mejores resultados se encuentran en [23]) con rendijas de 1 μ m de ancho y 8 μ m de separación, y con longitudes de onda de 0.56 a 1.03 Å²⁰. La longitud de onda de De Broglie en estos experimentos es por lo general más pequeña que el diámetro de la partícula²¹, mientras que en la difracción de electrones o neutrones es mucho más grande. De aquí que la longitud de onda de De Broglie de ninguna manera representa una medida del tamaño de la partícula.

A manera de conclusión de esta sección, remarcamos: las manifestaciones del comportamiento ondulatorio son estadísticos en la naturaleza y siempre surgen como resultados colectivos de muchos eventos, como en nuestro caso, de corpúsculos iguales pasando por una doble rendija.

1.5. Más allá de la mecánica cuántica

Hasta ahora queda claro que la realidad generalmente va más allá de nuestros sentidos. El intelecto humano extiende sus sentidos utilizando la tecnología y se ha llegado al punto de pensar que lo único que podemos anticipar de algún fenómeno es la probabilidad de que ocurra. La mecánica cuántica describe muy bien estas probabilidades dentro de su ámbito de validez. Entramos a un terreno filosófico, muy discutido y del cual hablaremos poco. ¿En verdad la naturaleza es tan azarosa o es que nuestras teorías hasta la fecha no bastan para describirla? Es la oportunidad que se da el autor de la presente para definir su forma de pensar y de proceder: realista y de acuerdo al método científico.

Que la interpretación y la matemática de una teoría, modelo o procedimiento describa bien dentro de un rango o escala a la naturaleza, no significa que definitivamente esté correcta. Un positivista podría opinar lo contrario. Y es que durante siglos hemos aprendido que nuestras teorías no son definitivas y son renovadas por mejores y más predictivas teorías que cambian nuestra concepción del universo. Creemos que nos acercamos cada vez más al conocimiento total de la naturaleza, aunque nadie ni nada asegura que llegaremos hasta el final.

En el experimento de la doble rendija, partícula a partícula atraviesan las rendijas y llegan a la pantalla en una localización que es probable de acuerdo a la teoría cuántica. ¿Y por cuál rendija pasó la partícula? No será el primero en preguntárselo (estoy seguro que cada persona, físico, filosofo, etc., se lo debió haber preguntado alguna vez). Richard Feynman lo discute ampliamente en sus libros [1, 26].

¹⁹Un ensemble es una colección hipotética infinitamente grande de réplicas del sistema físico, cada una de las cuales se encuentra en uno de los posibles estados dinámicos del sistema, consistentes con el hamiltoniano, las condiciones de frontera, etc. El ensemble no debe confundirse con un haz de partículas, que en realidad es un sistema de muchas partículas y cuya dinámica está descrita diferente. Podemos decir que tanto en el experimento de Hitachi como en el de Zeilinger y Gähler, sí se hizo aproximadamente la preparación de un ensemble, al hacer la densidad del haz de partículas tan baja que sólo una partícula a la vez estaba en vuelo, y lograr que no hubiera correlaciones entre partículas sucesivas.

²⁰Carnal y Mlynek [22] hacen una lista de aplicaciones de interferómetro del tipo de doble rendija. Mediante un campo externo variable se menciona que se podrían hacer pruebas al efecto Aharanov-Casher, demostraciones de la fase de Berry, o mediciones del cambio de fase causado por un sistema de referencia rotando o acelerándose. También, con los interferómetros de átomos se pueden averiguar varios efectos por interacciones luz-átomo resonantes.

 $^{^{21}}$ El radio atómico reportado del Helio es de 0.49 Å (Kenneth Barbalace http://klbprouctions.com/. Accessed on-line: $^{7/6/2006}$, http://EnvironmentalChemistry.com/yogi/periodic/He.html). El radio atómico es la distancia que existe entre el núcleo del átomo y el electrón estable más alejado del mismo.

El problema clásico que surge es al pensar que el paso de la partícula por una rendija (1) o por la otra (2) son eventos excluyentes (o independientes) y cuyas probabilidades se deberían poder sumar: la probabilidad $P(x \mid 1 \ y \ 2 \ abiertas)$ de que una partícula llegue a un punto x en la pantalla con ambas rendijas abiertas es igual a la probabilidad $P(x \mid 1 \ abierta \ y \ 2 \ cerrada)$ de que la partícula llegue a x pasando por la rendija 2 cerrada más la probabilidad $P(x \mid 1 \ cerrada \ y \ 2 \ abierta)$ de que la partícula llegue a x pasando por la rendija 2 con la rendija 1 cerrada. Sin embargo, esta adición simple de probabilidades no predice el patrón de difracción observado (compare los patrones de la figura 1.3.1b con los de la figura 1.3.2). Del experimento deducimos que $P(x \mid 1 \ y \ 2 \ abiertas) \neq P(x \mid 1 \ abierta \ y \ 2 \ cerrada) + P(x \mid 1 \ cerrada \ y \ 2 \ abierta)$ y este resultado no contradice a la teoría de la probabilidad, como varios autores afirman. Para una discusión detallada puede consultar [27] sección 5.8. Lo que nos está diciendo el resultado anterior es que el paso de una partícula por una rendija o por otra no son eventos mutuamente excluyentes. Es decir, en realidad sí existe un efecto físico o interacción de la rendija adyacente abierta, digamos 2, sobre la partícula pasando por la rendija 1, y esto se refleja en las distribuciones de probabilidad obtenidas. Pero, ¿cómo se produce esta correlación?

Regresando a la pregunta de por cuál rendija pasó la partícula, es bien sabido que cada vez que se ha intentado medir por cual rendija pasa la partícula, inevitablemente se ha perdido el patrón de difracción característico de la doble rendija. Heisenberg y Bohr (y muchos otros hasta la actualidad) aseguraban que es el principio de incertidumbre el responsable de cada intento fallido (y de cualquier intento en el futuro) de la preservación del patrón de difracción²². Desde nuestro punto de vista esto no debe resultar sorprendente porque desde la sección anterior sabíamos que, si el estado de preparación cambia, las distribuciones no tienen porqué ser las mismas pues no se describe el mismo ensemble y, por tanto, no es necesario invocar al principio de incertidumbre. Lo que sucede es la acción de un aparato de medición macroscópico que hace a los términos de interferencia despreciables²³.

En su libro sobre integrales de camino [26], Feynman encuentra una nueva forma de calcular la distribución de probabilidad de las partículas difractadas por rendijas (y en general para cualquier sistema), equivalente a resolver la ecuación de Schrödinger. Feynman sugiere que cada partícula, en su camino desde la fuente que la produce, pasando por las rendijas, hasta la pantalla, puede tomar cualquier trayectoria (vea figura 1.5.1). Aunque cualquier trayectoria es probable (tienen cierto peso estadístico), esto no significa que cada partícula tome todas las trayectorias como, de nuevo, algunos autores interpretan. No obstante, las integrales de camino de Feynman han probado ser una herramienta muy poderosa para hacer cálculos en sistemas muy complicados.

Durante la primera mitad del siglo pasado la mecánica cuántica fue desarrollada para incorporar la relatividad especial y el espín de las partículas. De ahí nacería la mecánica cuántica relativista. Poco después se desarrollaría la electrodinámica cuántica, la teoría de quarks para las interacciones fuertes o cromodinámica cuántica y la teoría de Glashow, Weinberg y Salam que combina las fuerzas electromagnéticas y débiles de una forma no trivial. Los físicos han llamado a todos estos esfuerzos que no incorporan a la relatividad general de Einstein con un modesto nombre: el Modelo Estándar. Recientemente se han sugerido mejoras para incrementar el poder predictivo de la teoría como la supersimetría o la introducción de dimensiones extras. Los intentos para incorporar los efectos gravitatorios (la relatividad general) corren por parte de dos teorías actualmente en desarrollo y muy de moda: la teoría de cuerdas y la gravedad

²²En muchos de los libros introductorios a la mecánica cuántica es común ejemplificar el principio de incertidumbre de Heisenberg con la imposibilidad de preservar el patrón de difracción de la doble rendija al medir por cuál rendija pasan las partículas a difractarse. Inmediatamente después se habla del "colapso" de la función de onda.

 $^{^{23}}$ Esta es una antítesis del colapso de onda. Para mayor detalle vea [28] y las referencias que ahí se citan.

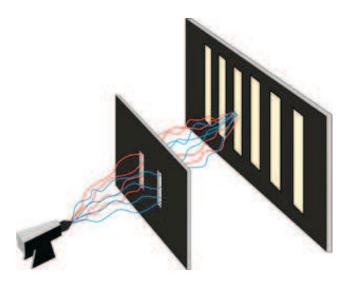


FIGURA 1.5.1. Doble rendija y trayectorias de Feynman.

cuántica (o Loop Quantum Gravity). El común denominador de todas estas teorías (con excepción de la relatividad general) es que se ha renunciado a la descripción exacta o determinista de los sistemas en consideración (no existen las trayectorias en el espacio-tiempo). La mayoría de los físicos han aceptado el comportamiento aleatorio (por ejemplo, de los electrones) como un fenómeno irreducible a términos más elementales o "acausal", y por tanto desde este punto de vista no hay mucho más que investigar en conexión con esta azarosidad. Así, en los últimos 70 años muchos físicos han tomado una actitud "pragmática" que ignora las preguntas conceptuales y sólo se interesa en desarrollar una teoría, a veces sin preocuparse si el mundo predicho corresponde a lo observado pensando que esto es evidencia de lo mucho que se ha avanzado en conocimiento.

Existe una corriente de pensamiento que interpreta a la mecánica cuántica como una teoría estadística pero que de ninguna manera la considera completa. Desde este punto de vista la teoría cuántica está a nivel puramente descriptivo (teoría fenomenológica) y las leyes fundamentales de la física son deterministas pero no se conoce la causa del indeterminismo cuántico (teoría causal). Físicos tan importantes como Einstein, Schrödinger, Bohm, etc., estaban apegados a esta corriente de pensamiento y dieron muchos argumentos que intentaban demostrar que la teoría cuántica es incompleta. Muchos otros trataron de contradecir estos argumentos²⁴.

En 1952 David Bohm [34] sugiere una interpretación de la teoría cuántica en términos de "variables ocultas", una idea trabajada antes por De Broglie en 1926 y abandonada por ciertas críticas de sus contemporáneos, como Pauli [9, 34, 35]. A pesar de los numerosos intentos de descartar las teorías de variables ocultas, la teoría cuántica de Bohm demuestra definitivamente que sí son posibles (aunque hasta ahora no tienen mucho más poder predictivo que la teoría cuántica convencional). Considerando la ecuación de Schrödinger (1.2.2) y expresando $\Psi(\overrightarrow{r},t)$ en términos de su amplitud y fase como

(1.5.1)
$$\Psi(\overrightarrow{r},t) = R(\overrightarrow{r},t) \exp[iS(\overrightarrow{r},t)/\hbar],$$

²⁴Esta discusión ha sido larga y confusa. Una posible línea de revisión para el lector interesado podría ser [29, 30, 31, 32]. Una bibliografía extensa puede encontrarse en [33].

se encuentra que,

(1.5.2)
$$\frac{\partial P(\overrightarrow{r},t)}{\partial t} + \nabla \cdot \left[P(\overrightarrow{r},t) \frac{\nabla S(\overrightarrow{r},t)}{m} \right] = 0,$$

$$(1.5.3) \qquad \frac{\partial S(\overrightarrow{r},t)}{\partial t} + \frac{\left[\nabla S(\overrightarrow{r},t)\right]^2}{2m} + \left[V(\overrightarrow{r},t) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R(\overrightarrow{r},t)}{R(\overrightarrow{r},t)}\right] = 0,$$

donde $P(\overrightarrow{r},t) = R(\overrightarrow{r},t)^2 = |\Psi(\overrightarrow{r},t)|^2$. La ecuación (1.5.2) es simplemente la conservación de la probabilidad, identificando el flujo de probabilidad como

(1.5.4)
$$\overrightarrow{J}(\overrightarrow{r},t) = P(\overrightarrow{r},t) \frac{\nabla S(\overrightarrow{r},t)}{m}.$$

La ecuación (1.5.3) es muy interesante: tiene la forma de una ecuación de Hamilton-Jacobi [36]. Esto sugiere que el último término (todo el corchete) es un potencial efectivo que siente una partícula de masa m. El segundo término en el corchete es un potencial adicional al clásico, que depende de la totalidad del sistema, y que suele denominarse potencial cuántico de Bohm:

$$(1.5.5) V_B(\overrightarrow{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R(\overrightarrow{r},t)}{R(\overrightarrow{r},t)}.$$

Si introducimos el campo de velocidades²⁵

(1.5.6)
$$\overrightarrow{v}(\overrightarrow{r},t) := \frac{\overrightarrow{J}(\overrightarrow{r},t)}{P(\overrightarrow{r},t)} = \frac{\nabla S(\overrightarrow{r},t)}{m},$$

podemos definir las trayectorias cuánticas a través de

(1.5.7)
$$\frac{d\overrightarrow{r}}{dt} := \overrightarrow{v}(\overrightarrow{r}, t).$$

También, tomando el gradiente a la ecuación (1.5.3), $\overrightarrow{v}(\overrightarrow{r},t)$ obedece la relación

(1.5.8)
$$m\frac{d\overrightarrow{v}(\overrightarrow{r},t)}{dt} = -\nabla \left[V(\overrightarrow{r},t) + V_B(\overrightarrow{r},t)\right],$$

que tiene la forma usual de Newton (con un potencial adicional extraño). No es trivial demostrar que el potencial de Bohm desaparece cuando $\hbar \to 0$. Si en efecto lo hiciese, la fase de Ψ y la función principal de Hamilton en mecánica clásica (denotadas ambas con S) obedecen las mismas ecuaciones matemáticas. Este último es un generador de trayectorias a través de su gradiente en (1.5.6). ¿Es correcto interpretar la fase de la función de estado como un generador de trayectorias reales? En las interpretaciones usuales de la mecánica cuántica no existe tal asociación y esto sugiere una posible línea de investigación. Se podría extender el enfoque estadístico de la mecánica cuántica identificando a las trayectorias cuánticas con las trayectorias promedio reales. El modelo funciona pues la ecuación de continuidad (1.5.2) garantiza que si la densidad de probabilidad del ensemble de trayectorias cuánticas coincide con $P_0 = |\Psi_0|^2$ en algún tiempo inicial, luego el movimiento a lo largo de las trayectorias preservará esta igualdad para cualquier tiempo. Philippidis, Dewdney y Hiley [37] en 1979 hicieron un cálculo de las trayectorias cuánticas (resolviendo numéricamente la ecuación (1.5.7)) que describen el experimento de la doble rendija. Mostramos un resultado más reciente de Holland y Philippidis en la figura 1.5.2. Como se observa, la distribución depende de la densidad de trayectorias, formándose picos de difracción debido a la fuerza producida por el potencial cuántico de Bohm. La forma precisa de cada trayectoria es sensible a cambios en las variables que describen

 $^{^{25}}$ La ecuación (1.5.6) suele llamarse ecuación guía o de orientación (del inglés guiadance) de De Broglie-Bohm y se define así por analogía con la hidrodinámica.

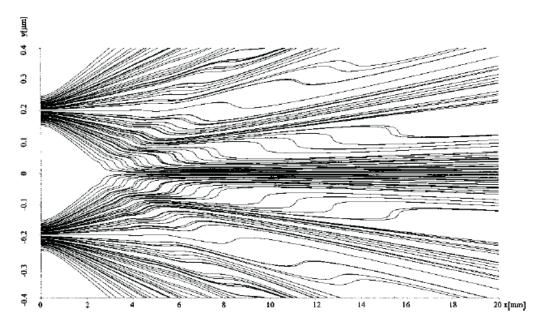


FIGURA 1.5.2. Trayectorias calculadas por Holland y Philippidis [38] usando a ley de De Broglie-Bohm (1.5.6) y la definición (1.5.7). La función de onda es una superposición de paquetes gaussianos en la dirección y centradas en las rendijas. Note que ninguna de las trayectorias cruza la línea de simetría.

los alrededores de la partícula de una manera *no-local* por la correlación que existe con el potencial cuántico, y por tanto cada partícula viajando por el aparato "sabe" o responde a la estructura global de su alrededor²⁶. Que estas correlaciones no locales existan²⁷ ya no puede ser objetada después de conocer los resultados de los experimentos de Aspect [32]. De acuerdo a ciertos autores [39] estos experimentos tienen una explicación perfectamente causal a través del potencial de Bohm.

La teoría cuántica de Bohm ha sido mejorada y extendida a lo largo de los años para describir el caso más general de sistemas de varias partículas relativistas con espín, distinguibles e indistinguibles (vea por ejemplo [28, 38, 40]). Sin embargo, hasta ahora no se ha logrado una descripción totalmente determinista de la trayectoria de cada partícula. Los intentos de De Broglie con su propuesta de una doble solución [9, 35] han sido abandonados casi totalmente (solo algunas ideas implementadas en la teoría cuántica de Bohm). En esta teoría se proponen dos ondas diferentes, una que es objetiva y representa la realidad física, que por su relación íntima con la partícula permite determinar su comportamiento. La otra es una construcción subjetiva que se basa en la información que se posee de la onda objetiva y provee una representación probabilista de la partícula (la función de onda). Debido a que la primera onda debería tener una singularidad que estuviese asociada con la partícula, la matemática se dificulta bastante pues implicaba no-linealidad en las ecuaciones.²⁸

Las teorías estocásticas parecen ser una opción con más futuro para explicar de forma objetiva el comportamiento azaroso de las partículas. La *mecánica estocástica* con procesos Markovianos ha dado

 $^{^{26}}$ Esto da en cierta forma una explicación de porqué cuando se cierra o se perturba por observación una de las dos rendijas el patrón característico de la doble rendija desaparece, al parecer de forma instantánea, y lo que se observa es el patrón característico de una rendija.

²⁷A causa de esta aparente no localidad, el modelo del potencial cuántico fue visto por mucho tiempo como una curiosidad matemática sin significado físico.

²⁸El lector interesado en las diversas propuestas alternas a la interpretación ortodoxa podría consultar el libro de M. Jammer [41] o la bibliografía recomendada en [33].

resultados muy alentadores para seguir adelante suponiendo procesos más complicados [42]. Otro "frente de ataque" es por medio de la electrodinámica estocástica, teoría en la que se supone que cada partícula está sujeta a un campo electromagnético estocástico de fondo (además de que la partícula a su vez radia a causa del movimiento que adquiere) responsable de los fenómenos que llamamos cuánticos. De acuerdo a Luis de la Peña²⁹ [43], "el hecho de que el campo de fondo interacciona con la materia, puede servir de base para construir un argumento heurístico que explica una de las propiedades más bizarras de los sistemas cuánticos: el hecho de que una modificación arbitraria en una parte del arreglo del dispositivo experimental (como abrir una rendija) puede producir modificaciones en las trayectorias de electrones aparentemente independientes, pero que se mueven en otra parte del dispositivo experimental (por ejemplo, que pasan por otra rendija)". Y agrega, "basta observar que toda modificación del dispositivo afecta al patrón del campo de fondo en toda la vecindad; esto a su vez modifica el movimiento de los electrones que cruzan la región afectada, debido a su acoplamiento con el campo".

²⁹El investigador mexicano Luis de la Peña es uno de los líderes en el desarrollo de la electrodinámica estocástica (o simplemente EDE). En su libro de introducción a la mecánica cuántica [35] hace una breve descripción de la EDE y la presenta como una alternativa seria, en proceso de exploración, que serviría como base para la ulterior fundamentación de la teoría cuántica contemporánea. Luis de la Peña refiere (en [43] p. 782) a la mecánica (cuántica) estocástica como una versión fenomenológica de la EDE. Una revisión más extensa de la EDE se encuentra en [44].

CAPíTULO 2

Modelo teórico

... Ahora sabemos cómo se comportan los electrones y la luz. Pero, ¿cómo puedo describirlo? Si digo que se comportan como partículas doy una impresión equivocada; lo mismo ocurre si digo que se comportan como ondas. Se comportan en una forma particular e inimitable... Se comportan en una forma que no se parece a nada de lo que hayan visto ustedes antes....

Richard Feynman (1967)

2.1. Dispersión por un potencial

Muchos experimentos en física consisten en dirigir un haz de partículas sobre un blanco compuesto de partículas y estudiar los resultados de la colisión. Nosotros estamos interesados en el estudio de la dispersión elástica de las partículas incidentes por el blanco¹. Como hemos visto, cuando tratamos con partículas microscópicas debemos hacer uso de la Mecánica Cuántica y estudiar la evolución de la función de onda asociada al fenómeno, en este caso, de dispersión. No se pretende atacar el problema en su forma más general, por lo cual vamos a simplificar con las siguientes hipótesis:

- 1. Supondremos que las partículas que inciden y las del blanco no tienen espín.
- 2. No tomaremos en cuenta la posible estructura interna de las partículas. Nos restringiremos al caso de dispersión elástica, que no afecta la estructura interna de las partículas.
- 3. Vamos a asumir que el sistema está aislado; en otras palabras, que el potencial V, producido por las partículas blanco, no depende explícitamente del tiempo.

2.2. Solución analítica rigurosa al problema estacionario para una rendija

El problema a resolver es el de una onda estacionaria, con energía ε fija y conocida, que incide sobre una pared impenetrable con rendijas en ella. Primero haremos la reducción del problema a uno bidimensional. Para ello vamos a suponer una pared impenetrable de grosor finito b, que se extiende paralelamente a todo el plano x-z centrada en y=0. Existe una rendija (o abertura en la pared) localizada de x=0 a x=a para todo z en los números reales. El potencial está dado por

(2.2.1)
$$V(x,y,z) = \begin{cases} \infty & x \in (-\infty,0] \bigcup [a,\infty), \ y \in [-\frac{b}{2},\frac{b}{2}] \ \text{y} \ \forall z \in \mathbb{R} \\ 0 & \text{en otra parte} \end{cases}.$$

¹Las colisiones entre partículas pueden ser inelásticas y llevar, bajo ciertas condiciones, a numerosas reacciones (por ejemplo, creación y destrucción de partículas), particularmente si la energía de las partículas incidentes es alta. Cuando tales reacciones son posibles, y uno detecta solo partículas dispersadas elásticamente, se observa que ciertas partículas del haz incidente "desaparecen"; es decir, no se encontrarán en el haz transmitido ni entre las partículas dispersadas elásticamente. Se dice que estas partículas son "absorbidas" durante la interacción ([45] complemento BVIII).

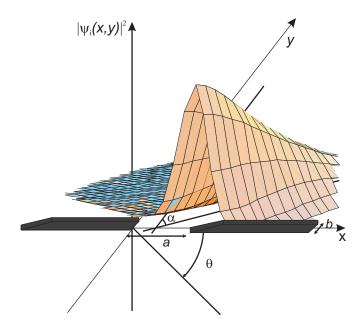


FIGURA 2.2.1. Rendija de difracción. El haz incidente hace un ángulo α con el eje y. El ángulo θ es usado para describir el patrón de interferencia.

Por construcción V(x,y,z)=V(x,y). Proponiendo la separación de variables $\phi(x,y,z)=\psi(x,y)f(z)$, se sigue:

$$\label{eq:force_eq} \begin{split} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x,y,z) \right] \phi(x,y,z) &= \varepsilon \phi(x,y,z) \\ \Rightarrow f(z) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x,y) \right] \psi(x,y) - \frac{\hbar^2}{2m} \psi(x,y) \frac{d^2}{dz^2} f(z) &= \varepsilon \psi(x,y) f(z) \end{split}$$

$$(2.2.2) \qquad \Rightarrow \frac{1}{\psi(x,y)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x,y) \right] \psi(x,y) - \frac{\hbar^2}{2mf(z)} \frac{d^2}{dz^2} f(z) = \varepsilon := E + E_z,$$

de donde se deben cumplir

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x,y) \right] \psi(x,y) = E\psi(x,y) \quad \mathbf{y}$$

(2.2.4)
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} f(z) = E_z f(z).$$

De esta última ecuación concluimos que el comportamiento en z es el de una partícula libre, $f(z) = e^{ik_z z}$ con $k_z \equiv \sqrt{2mE_z/\hbar^2} = \text{constante}$, y resta resolver (2.2.3). Desde este punto de vista decimos que hemos reducido el problema de uno tridimensional a uno bidimensional; es decir, ya que la componente z del momento lineal es conservada, podemos considerar sin pérdida de generalidad y con objeto de simplicar las expresiones, que esta componente es nula. Por lo tanto, en este trabajo la función de onda tendrá simetría cilíndrica (por ejemplo, vea la figura 2.2.1).

Evidentemente, en las paredes la solución de (2.2.3) es cero, pues una fuerza infinita impide que la partícula penetre por éstas.

Sea

$$(2.2.5) \hspace{1cm} W = \left\{ (x,y) \in \mathbb{R}^2 \,\middle|\, x \in (-\infty,0] \,\bigcup [a,\infty) \ \mathbf{y} \ y \in [-\frac{b}{2},\frac{b}{2}] \right\}.$$

Para todos los puntos en W,

$$(2.2.6) \psi_W(x,y) = 0,$$

donde hemos agregado un subíndice "W" para indicar que esta es la solución de la función de onda en la región definida por los puntos del conjunto W.

Por otro lado la ecuación de Schrödinger estacionaria (2.2.3), en el espacio libre, queda

$$(2.2.7) -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi(x, y) = E\psi(x, y).$$

Definimos además

(2.2.8)
$$k^2 := \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{p^2}{\hbar^2}.$$

La energía E es no negativa. Sustituyendo (2.2.8) en (2.2.7), obtenemos

(2.2.9)
$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + k^2\right) \psi(x, y) = 0.$$

Esta es la llamada ecuaci'on de Helmholtz. k es el número de onda (y es un número fijo, pues la energía es fija) y es conveniente verlo como la magnitud de un vector al que se le llama vector de onda:

$$(2.2.10) \qquad \overrightarrow{k} = (k_x, k_y),$$

$$(2.2.11) k := \left| \overrightarrow{k} \right| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}.$$

La ecuación de Helmholtz es también la que describe a las componentes del campo electromagnético en el vacío y surge como consecuencia de la naturaleza ondulatoria de la luz. Generalmente se hace uso de funciones de Green para resolver esta ecuación para el problema de difracción (vea por ejemplo [46] cap. 10) y esta metodología da soluciones que están en términos de la misma solución en alguna región del espacio (ecuaciones integrales). Para obtener resultados concretos, generalmente se hacen aproximaciones o suposiciones físicas que no siempre son consistentes o que restringen los resultados a ciertas regiones del espacio. Otra manera de resolver la ecuación (2.2.9) es expandir ψ en una base ortonormal adecuada. La base que se utilice debería ser conveniente y de acuerdo a la simetría del problema. A continuación desarrollamos una metodología basada en esta idea.

Podemos suponer que nuestra función de onda $\psi(x,y)$ se puede construir por una superposición de ondas planas con diferentes vectores de onda cada una, con la única restricción de que la magnitud de estos vectores sea k (debido a que esta magnitud física permanece constante en (2.2.9)), y por supuesto pidiendo que $\psi(x,y)$ cumpla las condiciones de frontera y de continuidad². Debemos encontrar la función de peso $\vartheta(\overrightarrow{k})$ que multiplica a cada una de estas ondas planas,

(2.2.12)
$$\psi(x,y) = \int_{|\overrightarrow{k}|=k} \vartheta(\overrightarrow{k}) e^{i\overrightarrow{k}\cdot\overrightarrow{r}} d\overrightarrow{k}.$$

Simplemente hemos propuesto que la función de onda se puede escribir como una integral de Fourier bidimensional o transformada de Fourier³ con la condición de que la magnitud del vector de onda de las ondas planas permanezca constante. Esta condición introduce una dependencia entre k_x y k_y que reduce

²Es una propiedad de la ecuación diferencial (2.2.3) que las funciones ψ y $\frac{\partial \psi}{\partial x_i}$ sean continuas $\forall \overrightarrow{x} \in \mathbb{R}^2$ ([47] complemento HI), a menos que en $\overrightarrow{a} \in \mathbb{R}^2$ exista una discontinuidad infinita del potencial V, la cual generalmente induce una discontinuidad finita en $\frac{\partial \psi(\overrightarrow{a})}{\partial x_i}$ [48].

³Se recomienda ampliamente leer el apéndice B al lector no familiarizado con esta herramienta.

la integral a una de Fourier unidimensional. Luego, por la simetría en x, podemos dejar a y en el espacio de configuración y hacer que p_x sea la variable de Fourier asociada a x:

(2.2.13)
$$\psi(x,y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(p_x,y) e^{\frac{i}{\hbar}p_x x} dp_x.$$

Dividiremos el problema en tres regiones. 1) La región incidente, 2) la región transmitida y 3) la región en la abertura.

1. Región incidente.

Sea

(2.2.14)
$$U = \left\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid y \ge \frac{b}{2} \text{ y } x \in \mathbb{R} \right\}.$$

Sustituimos (2.2.8) y (2.2.13) en (2.2.9):

$$\begin{split} \nabla^2 \psi(x,y) + k^2 \psi(x,y) &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(p_x,y) e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} \mathrm{d} p_x \right) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(p_x,y) e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} \mathrm{d} p_x \right) + \\ &+ \frac{p^2}{\hbar^2} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(p_x,y) e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} \mathrm{d} p_x = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \Psi(p_x,y) \left(\frac{i}{\hbar} p_x \right)^2 e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} \mathrm{d} p_x + \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left(\Psi(p_x,y) \right) e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} \mathrm{d} p_x + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p^2}{\hbar^2} \Psi(p_x,y) e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} \mathrm{d} p_x \right] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} \Psi(p_x,y) + \frac{p^2 - p_x^2}{\hbar^2} \Psi(p_x,y) \right) e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} \mathrm{d} p_x = 0. \end{split}$$

Entonces

(2.2.15)
$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} \Psi(p_x, y) + \frac{p^2 - p_x^2}{\hbar^2} \Psi(p_x, y) \right) e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} dp_x = 0.$$

Como (2.2.15) se cumple para toda $y \ge \frac{b}{2}$ (o porque las ondas planas forman una base linealmente independiente), entonces debe suceder que

(2.2.16)
$$\frac{\partial^2}{\partial u^2} \Psi(p_x, y) + \frac{p^2 - p_x^2}{\hbar^2} \Psi(p_x, y) = 0 \quad \forall p_x \in \mathbb{R}.$$

Definimos p_y , una nueva variable que toma valores reales no negativos $(|p_x| < p)$ e imaginarios puros $(|p_x| > p)$, como

$$(2.2.17) p_y := \sqrt{p^2 - p_x^2}.$$

La solución de (2.2.16) es bien conocida:

(2.2.18)
$$\Psi_U(p_x, y) = A(p_x)e^{-i\frac{p_y}{\hbar}y} + B(p_x)e^{i\frac{p_y}{\hbar}y}.$$

Sustituyendo en (2.2.13):

$$(2.2.19) \psi_U(x,y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} A(p_x) e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - p_y y)} \mathrm{d}p_x + \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} B(p_x) e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y)} \mathrm{d}p_x.$$

La forma en (2.2.18) sugiere que la primera integral de (2.2.19) representa un paquete de ondas incidente y la segunda un paquete de ondas reflejado hacia y > 0 (arriba). El primero tiene un vector de momento $\overrightarrow{P_1} = (p_x, -p_y)$ y el segundo $\overrightarrow{P_2} = (p_x, p_y)$. De tal forma que $A(p_x)$ representa la distribución espectral (o de amplitudes) de la onda incidente, la cual nosotros en principio conocemos, y $B(p_x)$ la

amplitud espectral de la onda reflejada, que deberá ser una función que dependa de la elección de $A(p_x)$ y de la solución que obtengamos en la rendija.

Cuando p_y es imaginario puro, el paquete de ondas incidente deja de ser oscilatorio y crece exponencialmente al aumentar y en la dirección positiva. Si $y \to \infty$ nuestra función de onda diverge y esto físicamente es inadmisible (un estado de dispersión tiende a partícula libre muy lejos del dispersor). Luego, debemos aceptar que la función $A(p_x)$ sea cero para $|p_x|$'s mayores que p. Esto es:

(2.2.20)
$$A(p_x) = 0 \text{ si } |p_x| > p.$$

Por otro lado, no tenemos ningún problema si y crece demasiado en el termino correspondiente al paquete de ondas reflejado pues éste decrece exponencialmente y se hace cero cuando $y \to \infty$. Estas son las llamadas ondas evanescentes y que no podemos cometer el error de dejar de considerarlas en nuestro análisis.

2. Región transmitida.

Sea

$$(2.2.21) D = \left\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid y \le -\frac{b}{2} \le x \in \mathbb{R} \right\}.$$

El procedimiento es análogo al del caso anterior. Sustituimos (2.2.8) y (2.2.13) en (2.2.9) y llegamos a que:

(2.2.22)
$$\Psi_D(p_x, y) = C(p_x)e^{-i\frac{p_y}{\hbar}y} + D(p_x)e^{i\frac{p_y}{\hbar}y}.$$

La solución será de la misma forma que (2.2.19) pero los coeficientes de las ondas planas son diferentes:

(2.2.23)
$$\psi_D(x,y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} C(p_x) e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - p_y y)} dp_x + \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} D(p_x) e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y)} dp_x.$$

La primera integral representa un paquete de ondas viajando hacia y < 0 (abajo). Este paquete, por supuesto, es el transmitido, y a medida que podamos obtener la amplitud $C(p_x)$ seremos capaces de describir el comportamiento de nuestra onda una vez que ha pasado por la rendija. La segunda integral representa un paquete de ondas que viene desde $y = -\infty$ hacia la rendija (incidencia por abajo). Si se restringe a la incidencia por arriba se debe tener⁴

$$(2.2.24) D(p_x) = 0.$$

Note que ahora no hay ningún problema cuando p_y es imaginario puro, pues estas ondas decaerán exponencialmente al crecer y en su dirección negativa. Entonces, la función de onda en todos los puntos del conjunto D es:

(2.2.25)
$$\psi_D(x,y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} C(p_x) e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - p_y y)} dp_x.$$

3. Región en la abertura.

Sea

(2.2.26)
$$S = \left\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 \,\middle|\, -\frac{b}{2} \le y \le \frac{b}{2} \text{ y } 0 \le x \le a \right\}.$$

⁴Por supuesto, es posible resolver el problema con la condición de incidencia por arriba y por abajo, simultáneamente. Sin embargo, en aras de simplificar el problema solamente consideramos incidencia por arriba.

A diferencia de los dos casos anteriores, en esta región tenemos condiciones de frontera en x. En x=0 y x=a nuestra función se debe anular. Nos encontramos en un pozo de potencial bidimensional, cerrado (infinito) por dos extremos (en la dirección de x) y abierto por los otros dos (en la dirección de y), una especie de guía de ondas cuántica.

Aunque podemos intentar resolver el problema en esta región con la metodología anterior, no es el objetivo de este trabajo tratar de hacer las cosas más difíciles de lo que son. Usaremos el método de separación de variables. Proponemos entonces que:

(2.2.27)
$$\psi_S(x,y) = X(x)Y(y).$$

Sustituyendo en la ecuación de Helmholtz (2.2.9) se sigue que

$$\frac{1}{X(x)}\frac{\partial^2}{\partial x^2}X(x) + \frac{1}{Y(y)}\frac{\partial^2}{\partial y^2}Y(y) + k^2 = 0$$

$$(2.2.28) \qquad \qquad \Rightarrow \frac{1}{X(x)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} X(x) = -\frac{1}{Y(y)} \frac{\partial^2}{\partial y^2} Y(y) - \frac{p^2}{\hbar^2} = -\frac{\rho^2}{\hbar^2},$$

donde en el último paso hemos usado (2.2.8) y hemos introducido la constante de separación $-\frac{\rho^2}{\hbar^2}$. Claro que esta constante de separación la hemos escogido no positiva. Si suponemos que es positiva llegaremos rápidamente a una contradicción.

La solución de (2.2.28) es inmediata,

(2.2.29)
$$X(x) = \alpha e^{\frac{i}{\hbar}\rho x} + \beta e^{-\frac{i}{\hbar}\rho x} \quad y$$

(2.2.30)
$$Y(x) = \gamma e^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{p^2 - \rho^2}y} + \delta e^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{p^2 - \rho^2}y}.$$

donde α , β , γ y δ son constantes. Considerando las condiciones de frontera en x,

$$\begin{split} X(0) &= 0 & \Rightarrow & \alpha + \beta = 0, \\ & \therefore \quad X(x) = & \alpha \left(e^{i\frac{\rho}{\hbar}x} - e^{-i\frac{\rho}{\hbar}x} \right) = 2i\alpha \sin\left(\frac{\rho}{\hbar}x\right). \\ X(a) &= 0 & \Rightarrow & 2i\alpha \sin\left(\frac{\rho}{\hbar}a\right) = 0 \Leftrightarrow \frac{\rho}{\hbar}a = n\pi \quad \forall n \in \mathbb{Z}, \end{split}$$

En esta última ecuación (como ρ toma valores discretos) hemos cambiado la notación ($\rho \to p_{x_n}$):

$$(2.2.32) p_{x_n} := \frac{n\pi\hbar}{a} y$$

$$(2.2.33) p_{y_n} := \sqrt{p^2 - \left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2}.$$

Luego, (2.2.30) queda

$$(2.2.34) Y_n(x) = \gamma_n e^{-\frac{i}{\hbar}p_{y_n}y} + \delta_n e^{\frac{i}{\hbar}p_{y_n}y}.$$

La solución de la n-ésima función de onda queda (renombrando de nuevo las constantes):

$$(2.2.35) \psi_{S_n}(x,y) = X_n(x)Y_n(y) = A_n e^{-\frac{i}{\hbar}py_n y} \sin\left(\frac{p_{x_n}}{\hbar}x\right) + B_n e^{\frac{i}{\hbar}py_n y} \sin\left(\frac{p_{x_n}}{\hbar}x\right) \forall n \in \mathbb{Z}.$$

La solución más general para la función de onda independiente del tiempo ψ_S en la región definida por S será la superposición de las funciones $\psi_{S_n}(x,y)$:

$$(2.2.36) \qquad \psi_S(x,y) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \psi_{S_n}(x,y) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n e^{-\frac{i}{\hbar}p_{y_n}y} \sin\left(\frac{p_{x_n}}{\hbar}x\right) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} B_n e^{\frac{i}{\hbar}p_{y_n}y} \sin\left(\frac{p_{x_n}}{\hbar}x\right).$$

Observe que el término n=0 no contribuye a las series. También que en la primera serie los términos n=m y n=-m pueden factorizarse gracias a la antisimetría de la función seno. Lo mismo pasa con los términos n=m y n=-m en la segunda serie. Si ponemos

$$(2.2.37) a_m = A_m - A_{-m},$$

$$(2.2.38) b_m = B_m - B_m,$$

es claro que $\psi_S(x,y)$ puede ser escrito como

(2.2.39)
$$\psi_S(x,y) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-\frac{i}{\hbar} p_{y_n} y} \sin\left(\frac{p_{x_n}}{\hbar} x\right) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n e^{\frac{i}{\hbar} p_{y_n} y} \sin\left(\frac{p_{x_n}}{\hbar} x\right).$$

En resumen, hemos obtenido la forma más general de las funciones de ondas independientes del tiempo en la región incidente (U), en la transmitida (D), en la abertura (S), y en las paredes (W). Por conveniencia definimos

$$(2.2.40) R = W \bigcup S,$$

que representa el conjunto de todos los puntos en el espacio que se encuentran en la abertura de la rendija, en sus paredes y dentro de éstas. Definiremos también

(2.2.41)
$$\varphi_n(x) := \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{p_{x_n}}{\hbar}x\right) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) & 0 \le x \le a \\ 0 & \text{para otras } x\text{'s} \end{cases} \forall n \in \mathbb{N}.$$

Se puede comprobar sin mucha dificultad que

(2.2.42)
$$(\varphi_m(x), \varphi_n(x)) := \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m^{\star}(x) \varphi_n(x) dx = \delta_{mn} \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

Podemos ahora escribir de manera más condensada nuestras soluciones:

(2.2.43)
$$\psi_U(x,y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} A(p_x) e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - p_y y)} dp_x + \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} B(p_x) e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y)} dp_x,$$

(2.2.44)
$$\psi_R(x,y) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-\frac{i}{\hbar} p_{y_n} y} \varphi_n(x) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n e^{\frac{i}{\hbar} p_{y_n} y} \varphi_n(x) \quad y$$

(2.2.45)
$$\psi_D(x,y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} C(p_x) e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - p_y y)} dp_x.$$

Observe que las incógnitas son $B(p_x)$, $C(p_x)$, a_n 's y b_n 's Tenemos una infinidad de incógnitas (pues n corre en los naturales). Sería bueno entonces considerar la continuidad de la función de onda en todo el espacio, en particular:

(2.2.46)
$$\psi_U(x, \frac{b}{2}) = \psi_R(x, \frac{b}{2}),$$

⁵Hemos absorbido una constante $\sqrt{\frac{a}{2}}$ que aparece en la función $\varphi_n(x)$ en las constantes $a_n y \ b_n$ de (2.2.44).

(2.2.47)
$$\psi_D(x, -\frac{b}{2}) = \psi_R(x, -\frac{b}{2}).$$

Sabemos de (2.2.18) y (2.2.22) que las transformadas de Fourier de (2.2.43) y (2.2.45) son

$$\Psi_U(p_x, y) = A(p_x)e^{-\frac{i}{\hbar}p_y y} + B(p_x)e^{\frac{i}{\hbar}p_y y},$$

(2.2.49)
$$\Psi_D(p_x, y) = C(p_x)e^{-\frac{i}{\hbar}p_y y}.$$

Es un poco más complicado encontrar la transformada de Fourier de ψ_R :

$$\Psi_{R}(p_{x},y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\psi_{R}(x,y)\right] e^{-\frac{i}{\hbar}p_{x}x} dx =$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} a_{n} e^{-\frac{i}{\hbar}p_{y_{n}}y} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{n}(x) e^{-\frac{i}{\hbar}p_{x}x} dx \right] + \sum_{n=1}^{\infty} b_{n} e^{\frac{i}{\hbar}p_{y_{n}}y} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{n}(x) e^{-\frac{i}{\hbar}p_{x}x} dx \right].$$

$$(2.2.50) \qquad \qquad \therefore \quad \Psi_{R}(p_{x},y) = \sum_{n=1}^{\infty} a_{n} e^{-\frac{i}{\hbar}p_{y_{n}}y} \Phi_{n}(p_{x}) + \sum_{n=1}^{\infty} b_{n} e^{\frac{i}{\hbar}p_{y_{n}}y} \Phi_{n}(p_{x}).$$

En este momento no calcularemos $\Phi_n(p_x)$. Basta saber que se puede calcular y que es la transformada de Fourier de nuestra función $\varphi_n(x)$.

Aplicando la transformada de Fourier a ambos lados del signo igual en (2.2.46):

$$\Psi_{U}(p_{x}, \frac{b}{2}) = \Psi_{R}(p_{x}, \frac{b}{2})$$

$$\Rightarrow A(p_{x})e^{-\frac{i}{\hbar}p_{y}\frac{b}{2}} + B(p_{x})e^{\frac{i}{\hbar}p_{y}\frac{b}{2}} = \sum_{n=1}^{\infty} a_{n}e^{-\frac{i}{\hbar}p_{y_{n}}\frac{b}{2}}\Phi_{n}(p_{x}) + \sum_{n=1}^{\infty} b_{n}e^{\frac{i}{\hbar}p_{y_{n}}\frac{b}{2}}\Phi_{n}(p_{x}).$$

$$(2.2.51) \qquad \therefore \quad B(p_x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-\frac{i}{\hbar}(p_{y_n} + p_y)\frac{b}{2}} \Phi_n(p_x) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n e^{\frac{i}{\hbar}(p_{y_n} - p_y)\frac{b}{2}} \Phi_n(p_x) - A(p_x) e^{-\frac{i}{\hbar}p_y b}.$$

Y también de (2.2.47):

$$\begin{split} \Psi_D(p_x, -\frac{b}{2}) &= \Psi_R(p_x, -\frac{b}{2}) \\ \Rightarrow C(p_x)e^{\frac{i}{\hbar}p_y\frac{b}{2}} &= \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{\frac{i}{\hbar}p_{y_n}\frac{b}{2}} \Phi_n(p_x) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n e^{-\frac{i}{\hbar}p_{y_n}\frac{b}{2}} \Phi_n(p_x). \end{split}$$

De la ecuaciones (2.2.51) y (2.2.52) vemos que $B(p_x)$ y $C(p_x)$ están determinados explícitamente por los valores de a_n y b_n (aunque tenemos dos incógnitas menos, aún restan una infinidad por determinar). Para terminar de resolver nuestro problema restaría encontrar de alguna manera los valores a_n y b_n .

Aún nos quedan dos condiciones que podrían servirnos en este momento. La derivada de la función de onda también debe de ser continua. Pero hay que tener cuidado con este recurso pues en zonas donde el potencial se hace infinito el enunciado anterior deja de ser verdadero. Entonces, es cierto que,

(2.2.53)
$$\frac{\partial \psi_U(x,y)}{\partial y} \bigg|_{y=\frac{b}{2}} = \frac{\partial \psi_R(x,y)}{\partial y} \bigg|_{y=\frac{b}{2}} \quad 0 \le x \le a,$$

(2.2.54)
$$\frac{\partial \psi_D(x,y)}{\partial y} \bigg|_{y=-\frac{b}{2}} = \frac{\partial \psi_R(x,y)}{\partial y} \bigg|_{y=-\frac{b}{2}} \quad 0 \le x \le a.$$

Por conveniencia definimos las siguientes funciones:

$$(2.2.55) f_U(x) := \frac{\partial \psi_U(x,y)}{\partial y} \Big|_{y=\frac{b}{2}} - \frac{\partial \psi_R(x,y)}{\partial y} \Big|_{y=\frac{b}{2}},$$

(2.2.56)
$$f_D(x) := \left. \frac{\partial \psi_D(x,y)}{\partial y} \right|_{y=-\frac{b}{2}} - \left. \frac{\partial \psi_R(x,y)}{\partial y} \right|_{y=-\frac{b}{2}}.$$

Observe también que:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\psi_U(x,y)}{\partial y}e^{-i\frac{p_x}{\hbar}x}dx = \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_U(x,y)e^{-i\frac{p_x}{\hbar}x}dx\right) = \frac{\partial\Psi_U(p_x,y)}{\partial y}.$$

Esto es, la transformada de Fourier de la derivada con respecto a y de la función de onda de la región de arriba es igual a la derivada con respecto a y de la transformada de Fourier de la misma función de onda. Lo mismo sucede con la función de onda en la región de abajo y en la rendija. Luego, tomando la transformada de Fourier de f_U y f_D debemos tener:

(2.2.57)
$$F_U(p_x) = \left. \frac{\partial \Psi_U(p_x, y)}{\partial y} \right|_{y=\frac{b}{2}} - \left. \frac{\partial \Psi_R(p_x, y)}{\partial y} \right|_{y=\frac{b}{2}},$$

(2.2.58)
$$F_D(p_x) = \left. \frac{\partial \Psi_D(p_x, y)}{\partial y} \right|_{y = -\frac{b}{2}} - \left. \frac{\partial \Psi_R(p_x, y)}{\partial y} \right|_{y = -\frac{b}{2}}.$$

Note lo siguiente: tanto $f_U(x)$ como $f_D(x)$ son cero en la región $0 \le x \le a$. Esto se sigue de inmediato por la continuidad de la derivada de la función de onda en esta región. Luego,

$$(\varphi_n(x), f_U(x)) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^{\star}(x) f_U(x) dx = \int_{-\infty}^{0} \underbrace{\varphi_n^{\star}(x)}_{=0} \underbrace{f_U(x)}_{\neq 0} dx + \int_{0}^{a} \varphi_n^{\star}(x) f_U(x) dx + \int_{a}^{\infty} \underbrace{\varphi_n^{\star}(x)}_{=0} \underbrace{f_U(x)}_{\neq 0} dx = 0$$

$$= \int_{0}^{a} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \underbrace{f_U(x)}_{=0} dx = 0.$$

Análogamente se encuentra que

$$(2.2.60) (\varphi_n(x), f_D(x)) = 0 \forall n \in \mathbb{N}.$$

Es importante notar del cálculo explícito de (2.2.59) que aún cuando pueda existir una discontinuidad de la derivada en y de la función de onda (vea nota al pie 2 en la página 23), esta situación queda "borrada" por las funciones base $\varphi_n(x)$, que son cero en el intervalo de la discontinuidad. Esto excluye la posibilidad de que exista efecto túnel por las paredes, por más pequeño que sea el grosor b.

Estamos a un paso de resolver el problema. Usando (2.2.59), (2.2.60) y el teorema de Parseval-Plancherel (B.2.5) obtenemos que

$$(2.2.61) \qquad (\Phi_n(p_x), F_U(p_x)) = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N},$$

У

$$(2.2.62) (\Phi_n(p_x), F_D(p_x)) = 0 \forall n \in \mathbb{N}.$$

Como veremos (2.2.61) y (2.2.62) son las ecuaciones que estábamos buscando para determinar a_n y b_n . Es fácil ver de (2.2.48), (2.2.50) y (2.2.49) que

(2.2.63)
$$\frac{\partial \Psi_U(p_x, y)}{\partial y} = \left(-\frac{i}{\hbar}p_y\right) A(p_x) e^{-\frac{i}{\hbar}p_y y} + \left(\frac{i}{\hbar}p_y\right) B(p_x) e^{\frac{i}{\hbar}p_y y},$$

$$(2.2.64) \qquad \frac{\partial \Psi_R(p_x, y)}{\partial y} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \left(-\frac{i}{\hbar} p_{y_n} \right) e^{-\frac{i}{\hbar} p_{y_n} y} \Phi_n(p_x) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \left(\frac{i}{\hbar} p_{y_n} \right) e^{\frac{i}{\hbar} p_{y_n} y} \Phi_n(p_x),$$

(2.2.65)
$$\frac{\partial \Psi_D(p_x, y)}{\partial y} = \left(-\frac{i}{\hbar}p_y\right)C(p_x)e^{-\frac{i}{\hbar}p_y y}.$$

Podemos sustituir el valor de $B(p_x)$ de (2.2.51) en (2.2.63) y evaluar en y = b/2:

(2.2.66)
$$\frac{\partial \Psi_{U}(p_{x}, y)}{\partial y}\Big|_{y=\frac{b}{2}} = \left(-\frac{2i}{\hbar}p_{y}\right) A(p_{x})e^{-\frac{i}{\hbar}p_{y}\frac{b}{2}} + \left(\frac{i}{\hbar}p_{y}\right) \sum_{n=1}^{\infty} a_{n}e^{-\frac{i}{\hbar}p_{yn}\frac{b}{2}} \Phi_{n}(p_{x}) + \left(\frac{i}{\hbar}p_{y}\right) \sum_{n=1}^{\infty} b_{n}e^{\frac{i}{\hbar}p_{yn}\frac{b}{2}} \Phi_{n}(p_{x}).$$

Lo mismo sustituyendo $C(p_x)$ de (2.2.52) en (2.2.65) y evaluando en y=-b/2:

$$(2.2.67) \qquad \frac{\partial \Psi_D(p_x, y)}{\partial y}\bigg|_{y=-\frac{b}{2}} = \left(-\frac{i}{\hbar}p_y\right) \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{\frac{i}{\hbar}p_{y_n}\frac{b}{2}} \Phi_n(p_x) + \left(-\frac{i}{\hbar}p_y\right) \sum_{n=1}^{\infty} b_n e^{-\frac{i}{\hbar}p_{y_n}\frac{b}{2}} \Phi_n(p_x).$$

Evaluemos (2.2.64) en $\frac{b}{2}$ y $-\frac{b}{2}$:

$$(2.2.68) \qquad \frac{\partial \Psi_R(p_x,y)}{\partial y}\bigg|_{y=\pm\frac{b}{2}} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \left(-\frac{i}{\hbar} p_{y_n}\right) e^{\mp\frac{i}{\hbar} p_{y_n} \frac{b}{2}} \Phi_n(p_x) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \left(\frac{i}{\hbar} p_{y_n}\right) e^{\pm\frac{i}{\hbar} p_{y_n} \frac{b}{2}} \Phi_n(p_x).$$

Ahora podemos calcular (2.2.57) y (2.2.58) con (2.2.66), (2.2.67) y (2.2.68). Se encuentra que 6

$$(2.2.69) F_{U} = \sum_{n=1}^{\infty} a_{n} \left[\frac{i}{\hbar} (p_{y} + p_{y_{n}}) e^{-\frac{i}{\hbar} p_{y_{n}} \frac{b}{2}} \Phi_{n} \right] + \sum_{n=1}^{\infty} b_{n} \left[\frac{i}{\hbar} (p_{y} - p_{y_{n}}) e^{\frac{i}{\hbar} p_{y_{n}} \frac{b}{2}} \Phi_{n} \right] + \left(\frac{2i}{\hbar} p_{y} \right) A e^{-\frac{i}{\hbar} p_{y} \frac{b}{2}}$$

у

$$(2.2.70) F_D = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \left[-\frac{i}{\hbar} (p_y - p_{y_n}) e^{i\frac{p_{y_n}}{\hbar} \frac{b}{2}} \Phi_n \right] + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \left[-\frac{i}{\hbar} (p_y + p_{y_n}) e^{-i\frac{p_{y_n}}{\hbar} \frac{b}{2}} \Phi_n \right].$$

Finalmente, sustituimos (2.2.69) y (2.2.70) en las ecuaciones (2.2.61) y (2.2.62):

$$(\Phi_{m}, F_{U}) = \sum_{n=1}^{\infty} a_{n} \left[\frac{i}{\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} p_{y_{n}} \frac{b}{2}} \left(\Phi_{m}, p_{y} \Phi_{n} \right) + \frac{i}{\hbar} p_{y_{n}} e^{-\frac{i}{\hbar} p_{y_{n}} \frac{b}{2}} \left(\Phi_{m}, \Phi_{n} \right) \right] +$$

$$+ \sum_{n=1}^{\infty} b_{n} \left[\frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p_{y_{n}} \frac{b}{2}} \left(\Phi_{m}, p_{y} \Phi_{n} \right) - \frac{i}{\hbar} p_{y_{n}} e^{\frac{i}{\hbar} p_{y_{n}} \frac{b}{2}} \left(\Phi_{m}, \Phi_{n} \right) \right] +$$

$$- \frac{2i}{\hbar} \left(\Phi_{m}, p_{y} A e^{-\frac{i}{\hbar} p_{y} \frac{b}{2}} \right) = 0$$

$$\forall m \in \mathbb{N}$$

⁶Para no hacer tan largas las ecuaciones, en lo que resta de esta sección, vamos a obviar la dependencia de F_U , F_D , A y Φ_n de p_x .

У

$$(2.2.72) \qquad (\Phi_{m}, F_{D}) = \sum_{n=1}^{\infty} a_{n} \left[-\frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p_{y_{n}} \frac{b}{2}} \left(\Phi_{m}, p_{y} \Phi_{n} \right) + \frac{i}{\hbar} p_{y_{n}} e^{\frac{i}{\hbar} p_{y_{n}} \frac{b}{2}} \left(\Phi_{m}, \Phi_{n} \right) \right] +$$

$$+ \sum_{n=1}^{\infty} b_{n} \left[-\frac{i}{\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} p_{y_{n}} \frac{b}{2}} \left(\Phi_{m}, p_{y} \Phi_{n} \right) - \frac{i}{\hbar} p_{y_{n}} e^{-\frac{i}{\hbar} p_{y_{n}} \frac{b}{2}} \left(\Phi_{m}, \Phi_{n} \right) \right] = 0 \qquad \forall m \in \mathbb{N}.$$

Podemos escribir de manera condensada (2.2.71) y (2.2.72) haciendo uso de la ec. (2.2.42) y del teorema de Parseval-Plancherel $(\varphi_m, \varphi_n) = (\Phi_m, \Phi_n) = \delta_{mn}$:

(2.2.73)
$$\sum_{n=1}^{\infty} \lambda_{mn}^{U} a_n + \sum_{n=1}^{\infty} \mu_{mn}^{U} b_n = \gamma_m \quad \forall m \in \mathbb{N},$$

(2.2.74)
$$\sum_{n=1}^{\infty} \lambda_{mn}^D a_n + \sum_{n=1}^{\infty} \mu_{mn}^D b_n = 0 \quad \forall m \in \mathbb{N},$$

con

(2.2.75)
$$\lambda_{mn}^{U} = e^{-\frac{i}{\hbar}p_{y_n}\frac{b}{2}} \left(\Phi_m, p_y \Phi_n\right) + p_{y_m} e^{-\frac{i}{\hbar}p_{y_m}\frac{b}{2}} \delta_{mn},$$

(2.2.76)
$$\lambda_{mn}^{D} = e^{\frac{i}{\hbar}p_{y_n}\frac{b}{2}} (\Phi_m, p_y \Phi_n) - p_{y_m} e^{\frac{i}{\hbar}p_{y_m}\frac{b}{2}} \delta_{mn},$$

(2.2.77)
$$\mu_{mn}^{U} = e^{\frac{i}{\hbar}p_{y_n}\frac{b}{2}} \left(\Phi_m, p_y \Phi_n\right) - p_{y_m} e^{\frac{i}{\hbar}p_{y_m}\frac{b}{2}} \delta_{mn},$$

(2.2.78)
$$\mu_{mn}^{D} = e^{-\frac{i}{\hbar}p_{y_n}\frac{b}{2}} \left(\Phi_m, p_y \Phi_n\right) + p_{y_m} e^{-\frac{i}{\hbar}p_{y_m}\frac{b}{2}} \delta_{mn},$$

(2.2.79)
$$\gamma_m = 2\left(\Phi_m, p_y A e^{-\frac{i}{\hbar}p_y \frac{b}{2}}\right).$$

Estrictamente esta es la solución del problema. Ya habíamos obtenido las funciones $B(p_x)$ y $C(p_x)$, y habíamos dicho que estaban en función de la infinidad de términos a_n y b_n . Ahora hemos encontrado el sistema que determina los valores de a_n y b_n . Este sistema está dado por las ecuaciones (2.2.73) y (2.2.74). Claro que en cada una de estas dos están contenidas una infinidad de ecuaciones (para cada m natural). En principio λ_{mn}^U , λ_{mn}^D , μ_{mn}^U , μ_{mn}^U y γ_m contienen integrales que pueden ser calculadas (al menos numéricamente). Para visualizar mejor a que hemos llegado, expresemos el sistema en forma matricial:

$$(2.2.80) \qquad \begin{pmatrix} \lambda_{11}^{U} & \lambda_{12}^{U} & \lambda_{13}^{U} & \dots \\ \lambda_{21}^{U} & \lambda_{22}^{U} & \lambda_{23}^{U} & \dots \\ \lambda_{31}^{U} & \lambda_{32}^{U} & \lambda_{33}^{U} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{1} \\ a_{2} \\ a_{3} \\ \vdots \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mu_{11}^{U} & \mu_{12}^{U} & \mu_{13}^{U} & \dots \\ \mu_{21}^{U} & \mu_{22}^{U} & \mu_{23}^{U} & \dots \\ \mu_{31}^{U} & \mu_{32}^{U} & \mu_{33}^{U} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{1} \\ b_{2} \\ b_{3} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma_{1} \\ \gamma_{2} \\ \gamma_{3} \\ \vdots \end{pmatrix},$$

$$(2.2.81) \qquad \begin{pmatrix} \lambda_{11}^{D} & \lambda_{12}^{D} & \lambda_{13}^{D} & \dots \\ \lambda_{21}^{D} & \lambda_{22}^{D} & \lambda_{23}^{D} & \dots \\ \lambda_{31}^{D} & \lambda_{32}^{D} & \lambda_{33}^{D} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{1} \\ a_{2} \\ a_{3} \\ \vdots \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mu_{11}^{D} & \mu_{12}^{D} & \mu_{13}^{D} & \dots \\ \mu_{21}^{D} & \mu_{22}^{D} & \mu_{23}^{D} & \dots \\ \mu_{31}^{D} & \mu_{32}^{D} & \mu_{33}^{D} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{1} \\ b_{2} \\ b_{3} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

Recapitulando, para resolver la ecuación (diferencial) de Helmholtz, se ha desarrollado la función de onda en una base continua en la región U y D, y en una base discreta en la región R. Es por esto que, al imponer la continuidad de la función de onda y su derivada (esta última sólo a través de la abertura), se

llega a un problema algebraico. El hecho es que ahora debemos resolver este sistema de 2 ecuaciones, que a su vez tienen una infinidad de ecuaciones, con una infinidad de incógnitas . El sistema puede escribirse en la forma más compacta,

$$\Lambda^{U} \overrightarrow{a} + M^{U} \overrightarrow{b} = \overrightarrow{\gamma},$$

(2.2.83)
$$\Lambda^{D}\overrightarrow{a} + M^{D}\overrightarrow{b} = \overrightarrow{0},$$

donde Λ^U , M^U , Λ^D , M^D , $\overrightarrow{\gamma}$, \overrightarrow{a} y \overrightarrow{b} representan las matrices de coeficientes λ^U_{mn} , μ^U_{mn} , λ^D_{mn} , μ^D_{mn} , γ_m , a_m y b_m , respectivamente. En esta forma es fácil mostrar que (vea apéndice A)

(2.2.84)
$$\overrightarrow{b} = \left[M^U - (\Lambda^U) (\Lambda^D)^{-1} M^D \right]^{-1} \overrightarrow{\gamma} \quad \mathbf{y}$$

$$(2.2.85) \qquad \overrightarrow{a} = -\left[M^{U}\left(M^{D}\right)^{-1}\left(\Lambda^{D}\right) - \left(\Lambda^{U}\right)\right]^{-1} \overrightarrow{\gamma}.$$

Para obtener resultados concretos de estas ecuaciones deberemos truncar las matrices para incluir los primeros n miembros o modos en la base $\{\varphi_n(x)\}$, necesarios para que la función de onda converja en la región calculada, es decir, que su gráfica prácticamente no se modifique por incluir n+1 modos. Este proceso de convergencia iterativa se aplica a lo largo del capítulo 3 y 4 para obtener resultados confiables.

Finalmente, para completar la solución, resta evaluar las entradas de las matrices. De (2.2.75)-(2.2.79), es necesario calcular algunas integrales las cuales, como veremos a continuación, no son triviales.

Consideremos las integrales del tipo $(\Phi_m, p_y \Phi_n)$. En el apéndice A se demuestra que

$$(2.2.86) \qquad (\Phi_m, p_y \Phi_n) = (\Phi_n, p_y \Phi_m) = \begin{cases} \frac{2\hbar}{\pi a} p_{x_m} p_{x_n} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sqrt{p^2 - p_x^2 \left(1 - \cos\frac{p_x a}{\hbar}\right)}}{(p_x^2 - p_{x_m}^2) (p_x^2 - p_{x_n}^2)}} \mathrm{d}p_x & n, m \text{ pares,} \\ \frac{2\hbar}{\pi a} p_{x_m} p_{x_n} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sqrt{p^2 - p_x^2 \left(1 + \cos\frac{p_x a}{\hbar}\right)}}{(p_x^2 - p_{x_m}^2) (p_x^2 - p_{x_n}^2)}} \mathrm{d}p_x & n, m \text{ impares y} \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

Las integrales de la ecuación (2.2.86) son difíciles. De hecho no hemos encontrado una solución cerrada de ellas. Basta graficar el integrando de algunas para darse cuenta de la dificultad (vea figura 2.2.2 y 2.2.3).

Como podemos ver, los integrandos oscilan demasiado. Podemos llevar la integral al plano complejo y aplicar técnicas de variable compleja para tratar de resolverla. De hecho, se ha logrado remover el comportamiento oscilatorio con un cambio conveniente de camino de integración [49]. En el apéndice A se demuestra que los integrandos tienen singularidades removibles en $p = \pm p_{x_m}$ y $p = \pm p_{x_n}$ y por tanto no tienen polos. Luego podemos reemplazar la trayectoria de integración inicial (que es el eje real) por Γ_1 mostrada en la figura 2.2.4. Como Γ_1 es simétrica con respecto al origen, entonces podemos poner:

(2.2.87)
$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sqrt{p^2 - p_x^2} \left(1 - (-1)^n \cos \frac{p_x a}{\hbar} \right)}{\left(p_x^2 - p_{x_m}^2 \right) \left(p_x^2 - p_{x_n}^2 \right)} dp_x = \int_{\Gamma_1} \frac{\sqrt{p^2 - z^2} \left(1 - (-1)^n e^{\frac{i}{\hbar} z a} \right)}{\left(z^2 - p_{x_m}^2 \right) \left(z^2 - p_{x_n}^2 \right)} dz.$$

Para la integral sobre Γ_1 podemos considerar el contorno de la figura 2.2.5. Es una consecuencia del lema de Jordan que la contribución de la integral sobre el semicirculo, cuando el radio tiende a infinito, es cero. También se puede demostrar que la contribución de Δ y Δ' es la misma (a menos que $p=p_{x_n}$). Finalmente,

(2.2.88)
$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sqrt{p^2 - p_x^2} \left(1 - (-1)^n \cos \frac{p_x a}{\hbar}\right)}{\left(p_x^2 - p_{x_m}^2\right) \left(p_x^2 - p_{x_n}^2\right)} dp_x = r_n \delta_{n,m} + 2 \int_{\Delta} \frac{\sqrt{p^2 - z^2} \left(1 - (-1)^n e^{\frac{i}{\hbar}za}\right)}{\left(z^2 - p_{x_m}^2\right) \left(z^2 - p_{x_n}^2\right)} dz,$$

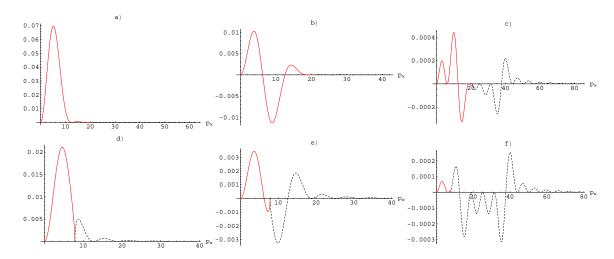


FIGURA 2.2.2. Gráfica de $\sqrt{p^2 - p_x^2} \left(1 - \cos \frac{p_x a}{\hbar}\right) \left(p_x^2 - p_{x_m}^2\right)^{-1} \left(p_x^2 - p_{x_n}^2\right)^{-1}$, integrando de (2.2.86) cuando n y m son pares. Hemos puesto $\hbar = 1$ y a = 1. a) n = m = 2, $\lambda = 0.3$. b) n = 2, m = 4, $\lambda = 0.3$. c) n = 4, m = 12, $\lambda = 0.3$. d) n = m = 2, $\lambda = 0.8$. e) n = 2, m = 4, $\lambda = 0.8$. f) n = 4, m = 12, $\lambda = 0.8$. La linea continua es la parte real de la función, y la punteada la imaginaria.

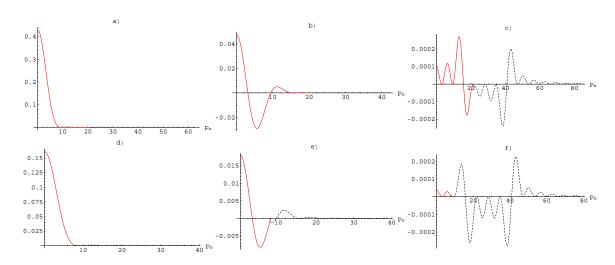


FIGURA 2.2.3. Gráfica de $\sqrt{p^2-p_x^2}\left(1+\cos\frac{p_x a}{\hbar}\right)\left(p_x^2-p_{x_m}^2\right)^{-1}\left(p_x^2-p_{x_n}^2\right)^{-1}$, integrando de (2.2.86) cuando n y m son impares. a) $n=m=1,\ \lambda=0.3.$ b) $n=1,\ m=3,\ \lambda=0.3.$ c) $n=5,\ m=13,\ \lambda=0.3.$ d) $n=m=1,\ \lambda=0.8.$ e) $n=1,\ m=3,\ \lambda=0.8.$ f) $n=5,\ m=13,\ \lambda=0.8.$ La linea continua es la parte real de la función, y la punteada la imaginaria.

donde r_n es el residuo del polo en $z=p_{x_n}$, el cual aparece ahora para m=n. Sobre Δ , $\exp\left(\frac{i}{\hbar}za\right)$ ya no oscila y el problema se reduce a una integral de una función bien comportada en el intervalo $[0,\infty]$. El programa utilizado para la solución numérica al problema de difracción por rendijas (capítulos 3 y 4) usa esta técnica de integración. El número de pasos o intervalos (partición) necesarios para la convergencia numérica de las integrales se desconoce en principio (una buena conservación de la probabilidad sería un indicativo de que hemos alcanzado el número de pasos óptimo). Este número de pasos en las integrales así como el número de modos en la base $\{\varphi_n(x)\}$ son parámetros que en este trabajo son optimizados

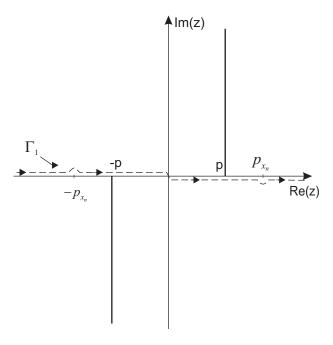


FIGURA 2.2.4. Trayectoria de integración en el plano complejo. La línea Re(z)=p, $\text{Im}(z)\geq 0,$ y Re(z)=-p, $\text{Im}(z)\leq 0$ son los cortes ramales asociados con la raíz cuadrada $\sqrt{p^2-p_x^2}$. Note que Γ_1 evita los puntos Im(z)=0, $\text{Re}(z)=\pm p_{x_n}.$

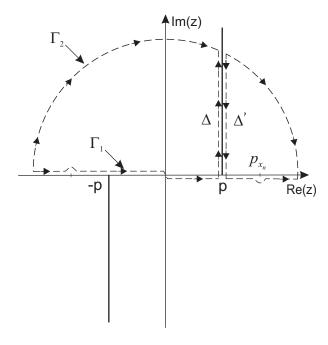


FIGURA 2.2.5. Γ_2 es la unión de Δ , Δ' y el semicirculo.

mediante un proceso de convergencia iterativa de los patrones de difracción, la densidad de probabilidad y la conservación de la probabilidad⁷.

 $^{^{7}}$ En realidad existen más complicaciones en el cálculo numérico, como por ejemplo, saber en que momento cortar las integrales o el número de puntos (en la malla) para cada gráfica.

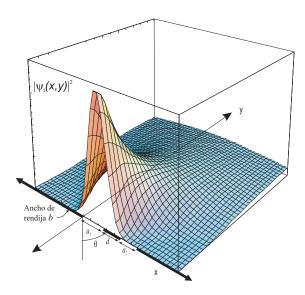


FIGURA 2.3.1. Difracción por dos rendijas.

El segundo tipo de integral aparece en γ_m . Para evaluar esta integral se necesita especificar la onda incidente. Por ser de gran interés práctico, en el apéndice A se estudia el caso particular en el cual la onda $\psi_i(x, \frac{b}{2})$ que incide sobre la pared es la función gaussiana en x,

(2.2.89)
$$\psi_i(x, \frac{b}{2}) = \exp\left[-\frac{4(x - x_0)^2}{\sigma^2}\right],$$

y en consecuencia (siendo consistentes con (2.2.20)),

(2.2.90)
$$\gamma_m = \sqrt{\frac{\sigma^2}{2\pi a}} p_{x_m} \int_{-p}^{p} \frac{\left((-1)^m e^{\frac{i}{\hbar} p_x a} - 1 \right) \sqrt{p^2 - p_x^2} e^{-\frac{\sigma^2 p_x^2}{16\hbar^2}} e^{-\frac{i}{\hbar} p_x x_0}}{p_x^2 - p_{x_m}^2} dp_x.$$

Esta integral también es complicada pero puede simplificarse de la misma forma como se hizo en el análisis anterior (deformando el contorno de integración) y calcularse numéricamente.

2.3. Solución analítica al problema estacionario para dos rendijas

Consideremos la misma reducción del problema tridimensional a uno bidimensional analizada al principio de la sección anterior. Basta entonces resolver la ecuación de Schrödinger (2.2.3) (bidimensional), considerando dos rendijas en el plano xy simuladas por el potencial

(2.3.1)
$$V(x,y) = \begin{cases} \infty & x \in (-\infty,0] \bigcup [a_1, a_1 + d] \bigcup [a_1 + a_2 + d, \infty) \text{ y } y \in [-\frac{b}{2}, \frac{b}{2}] \\ 0 & \text{en otra parte} \end{cases}$$

La geometría del problema se muestra en la figura 2.3.1. Nuevamente, en las paredes la función de onda es cero. En el problema de una rendija ya hemos calculado la función de onda en la región incidente y en la transmitida,

(2.3.2)
$$\psi_U(x,y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} A(p_x) e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - p_y y)} dp_x + \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} B(p_x) e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y)} dp_x \quad y$$

(2.3.3)
$$\psi_D(x,y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} C(p_x) e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - p_y y)} dp_x,$$

donde se ha definido, como antes,

$$(2.3.4) p_y := \sqrt{p^2 - p_x^2},$$

con $p_y \ge 0$ si $|p_x| \le p$, o $p_y = ib$, b > 0 si $|p_x| \ge p$.

La interpretación de cada término es la misma que en el caso de una rendija. Tampoco es muy difícil darnos cuenta que la solución en la primera abertura es exactamente la misma que ya habíamos obtenido. Sea

$$W = \left\{ (x,y) \in \mathbb{R}^2 \mid x \in (-\infty,0] \bigcup [a_1, a_1 + d] \bigcup [a_1 + a_2 + d, \infty) \ y \ y \in [-\frac{b}{2}, \frac{b}{2}] \right\},$$

$$S_1 = \left\{ (x,y) \in \mathbb{R}^2 \mid -\frac{b}{2} \le y \le \frac{b}{2} \ y \ 0 \le x \le a_1 \right\},$$

$$S_2 = \left\{ (x,y) \in \mathbb{R}^2 \mid -\frac{b}{2} \le y \le \frac{b}{2} \ y \ a_1 + d \le x \le a_1 + a_2 + d \right\},$$

entonces.

(2.3.5)
$$\psi_{S_1}(x,y) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-i\frac{p_{n,1}}{\hbar}y} \varphi_n^{(1)}(x) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n e^{i\frac{p_{n,1}}{\hbar}y} \varphi_n^{(1)}(x).$$

Hemos cambiado por conveniencia la notación:

(2.3.6)
$$q_{n,1} := \frac{n\pi\hbar}{a_1},$$

$$(2.3.7) p_{n,1} := \sqrt{p^2 - q_{n,1}^2},$$

$$(2.3.8) \varphi_n^{(1)}(x) := \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a_1}} \sin \frac{q_{n,1}}{\hbar} x = \sqrt{\frac{2}{a_1}} \sin \frac{n\pi x}{a_1} & 0 \le x \le a_1 \\ 0 & \text{para otras } x \text{'s} \end{cases} \forall n \in \mathbb{N}.$$

La solución en la segunda abertura debe ser de la misma forma que (2.3.5):

(2.3.9)
$$\psi_{S_2}(x,y) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-i\frac{p_{n,2}}{\hbar}y} \varphi_n^{(2)}(x) + \sum_{n=1}^{\infty} d_n e^{i\frac{p_{n,2}}{\hbar}y} \varphi_n^{(2)}(x),$$

con

$$(2.3.10) p_{n,2} := \sqrt{p^2 - q_{n,2}^2}.$$

Debemos pedir que se cumplan las condiciones de frontera en x. Esto es,

$$\psi_{S_2}(a_1 + d, y) = 0,$$

$$\psi_{S_2}(a_1 + a_2 + d, y) = 0.$$

Estas condiciones de frontera implican que:

donde

$$(2.3.14) q_{n,2} = \frac{n\pi\hbar}{a_2}.$$

Luego si definimos

$$(2.3.15) R = W \bigcup S_1 \bigcup S_2,$$

podemos resumir nuestros resultados en las paredes y las aberturas:

$$\psi_{R}(x,y) = \sum_{n=1}^{\infty} a_{n} e^{-\frac{i}{\hbar} p_{n,1} y} \varphi_{n}^{(1)}(x) + \sum_{n=1}^{\infty} b_{n} e^{\frac{i}{\hbar} p_{n,1} y} \varphi_{n}^{(1)}(x) +$$

$$+ \sum_{n=1}^{\infty} c_{n} e^{-\frac{i}{\hbar} p_{n,2} y} \varphi_{n}^{(2)}(x) + \sum_{n=1}^{\infty} d_{n} e^{\frac{i}{\hbar} p_{n,2} y} \varphi_{n}^{(2)}(x) =$$

$$= \sum_{k=1}^{2} \sum_{n=1}^{\infty} a_{n}^{(k)} e^{-\frac{i}{\hbar} p_{n,k} y} \varphi_{n}^{(k)}(x) + \sum_{k=1}^{2} \sum_{n=1}^{\infty} b_{n}^{(k)} e^{\frac{i}{\hbar} p_{n,k} y} \varphi_{n}^{(k)}(x),$$

$$(2.3.16)$$

donde en la última expresión hemos puesto

$$a_n^{(1)} = a_n; b_n^{(1)} = b_n; a_n^{(2)} = c_n; b_n^{(2)} = d_n.$$

La última igualdad en (2.3.16) es la más conveniente pues resulta ser la forma de la solución para el caso general de N rendijas (k correría desde 1 hasta N). Todavía nos resta decir cuanto vale la constante β_2 de (2.3.13). Quisiéramos que las funciones $\varphi_n^{(2)}(x)$ sean ortonormales, como lo son las funciones $\varphi_n^{(1)}(x)$. No es difícil demostrar que β_2 debe ser

(2.3.17)
$$\beta_2 = \sqrt{\frac{2}{a_2}}.$$

Procedemos a usar la continuidad de la función de onda,

$$\psi_U(x, \frac{b}{2}) = \psi_R(x, \frac{b}{2}),$$

lo que implica que sus transformadas de Fourier también cumplen esta igualdad:

$$\Psi_U(p_x, \frac{b}{2}) = \Psi_R(p_x, \frac{b}{2})$$

$$\Rightarrow A(p_x)e^{-\frac{i}{\hbar}p_y\frac{b}{2}} + B(p_x)e^{\frac{i}{\hbar}p_y\frac{b}{2}} \quad = \quad \sum_{k=1}^2\sum_{n=1}^\infty a_n^{(k)}e^{-\frac{i}{\hbar}p_{n,k}\frac{b}{2}}\Phi_n^{(k)}(x) + \sum_{k=1}^2\sum_{n=1}^\infty b_n^{(k)}e^{\frac{i}{\hbar}p_{n,k}\frac{b}{2}}\Phi_n^{(k)}(x).$$

$$(2.3.18) \quad \therefore \quad B(p_x) = \sum_{k=1}^{2} \sum_{n=1}^{\infty} a_n^{(k)} e^{-\frac{i}{\hbar}(p_{n,k} + p_y)\frac{b}{2}} \Phi_n^{(k)}(x) + \sum_{k=1}^{2} \sum_{n=1}^{\infty} b_n^{(k)} e^{\frac{i}{\hbar}(p_{n,k} - p_y)\frac{b}{2}} \Phi_n^{(k)}(x) - A(p_x) e^{-\frac{i}{\hbar}p_y b}.$$

Y también por

$$\psi_D(x, -\frac{b}{2}) = \psi_R(x, -\frac{b}{2}),$$

se debe cumplir la igualdad para sus transformadas de Fourier:

$$\Psi_D(p_x, -\frac{b}{2}) = \Psi_R(p_x, -\frac{b}{2}),$$

$$\Rightarrow C(p_x)e^{\frac{i}{\hbar}p_y\frac{b}{2}} = \sum_{k=1}^2 \sum_{n=1}^\infty a_n^{(k)} e^{-\frac{i}{\hbar}p_{n,k}\frac{-b}{2}} \Phi_n^{(k)}(p_x) + \sum_{k=1}^2 \sum_{n=1}^\infty b_n^{(k)} e^{\frac{i}{\hbar}p_{n,k}\frac{-b}{2}} \Phi_n^{(k)}(p_x).$$

$$(2.3.19) \qquad \qquad \therefore \quad C(p_x) = \sum_{k=1}^2 \sum_{n=1}^\infty a_n^{(k)} e^{\frac{i}{\hbar}(p_{n,k} - p_y)\frac{b}{2}} \Phi_n^{(k)}(p_x) + \sum_{k=1}^2 \sum_{n=1}^\infty b_n^{(k)} e^{-\frac{i}{\hbar}(p_{n,k} + p_y)\frac{b}{2}} \Phi_n^{(k)}(p_x).$$

La derivada de la función de onda es continua en zonas donde el potencial no se hace infinito (en las aberturas):

$$(2.3.20) \frac{\partial \psi_U(x,y)}{\partial y}\bigg|_{y=\frac{b}{2}} = \frac{\partial \psi_R(x,y)}{\partial y}\bigg|_{y=\frac{b}{2}} x \in [0,a_1] \bigcup [a_1+d,a_1+a_2+d],$$

(2.3.21)
$$\frac{\partial \psi_D(x,y)}{\partial y} \bigg|_{y=-\frac{b}{2}} = \frac{\partial \psi_R(x,y)}{\partial y} \bigg|_{y=-\frac{b}{2}} \quad x \in [0,a_1] \bigcup [a_1+d,a_1+a_2+d].$$

Como antes definimos

$$(2.3.22) f_U(x) := \frac{\partial \psi_U(x,y)}{\partial y} \Big|_{y=\frac{b}{2}} - \frac{\partial \psi_R(x,y)}{\partial y} \Big|_{y=\frac{b}{2}} y$$

(2.3.23)
$$f_D(x) := \left. \frac{\partial \psi_D(x,y)}{\partial y} \right|_{y=-\frac{b}{2}} - \left. \frac{\partial \psi_R(x,y)}{\partial y} \right|_{y=-\frac{b}{2}}.$$

Observe que en general, si $x_{inf}^{(l)}$ y $x_{sup}^{(l)}$ son los bordes inferior y superior, respectivamente, de la l-ésima rendija, las siguientes igualdades se cumplen para cada m y l:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m^{(l)\star}(x) f_U(x) dx = \int_{-\infty}^{x_{inf}^{(l)}} \underbrace{\varphi_m^{(l)\star}(x)}_{=0} \underbrace{f_U(x)}_{\neq 0} dx + \int_{x_{inf}^{(l)}}^{x_{sup}^{(l)}} \varphi_n^{(l)\star}(x) \underbrace{f_U(x)}_{=0} dx + \int_{x_{sup}^{(1)}}^{\infty} \underbrace{\varphi_n^{\star}(x)}_{\neq 0} \underbrace{f_U(x)}_{\neq 0} dx = 0,$$

de donde el posible tunelamiento por las paredes queda suprimido por las funciones base $\varphi_m^{(l)}$ y la continuidad de la derivada de la función de onda por las rendijas. Luego,

$$\left(\varphi_m^{(l)}(x), f_U(x)\right) = 0 \quad \forall m \in \mathbb{N}, \ l \in \{1, 2\}.$$

Análogamente,

$$\left(\varphi_m^{(l)}(x), f_D(x)\right) = 0 \quad \forall m \in \mathbb{N}, \ l \in \{1, 2\}.$$

Del teorema de Parseval-Plancherel,

(2.3.26)
$$\left(\Phi_m^{(l)}(p_x), F_U(p_x)\right) = 0 \quad \forall m \in \mathbb{N}, \ l \in \{1, 2\}$$

у

(2.3.27)
$$\left(\Phi_m^{(l)}(p_x), F_D(p_x)\right) = 0 \quad \forall m \in \mathbb{N}, \ l \in \{1, 2\},$$

en donde $F_U(p_x)$ y $F_D(p_x)$ es la diferencia de las transformadas de Fourier de la derivada normal del campo de Schrödinger por arriba y por abajo en los bordes de las regiones definidos por y = b/2 y y = -b/2:

(2.3.28)
$$F_U(p_x) := \frac{\partial \Psi_U(p_x, y)}{\partial y} \bigg|_{y=\frac{b}{2}} - \frac{\partial \Psi_R(p_x, y)}{\partial y} \bigg|_{y=\frac{b}{2}} \quad y$$

(2.3.29)
$$F_D(p_x) := \left. \frac{\partial \Psi_D(p_x, y)}{\partial y} \right|_{y = -\frac{b}{2}} - \left. \frac{\partial \Psi_R(p_x, y)}{\partial y} \right|_{y = -\frac{b}{2}}.$$

El procedimiento para calcular F_U y F_D es prácticamente el mismo que el de una rendija. Se obtiene que⁸

$$(2.3.30) F_{U} = \sum_{k=1}^{2} \sum_{n=1}^{\infty} a_{n}^{(k)} \left[\frac{i}{\hbar} (p_{y} + p_{n,k}) e^{-\frac{i}{\hbar} p_{n,k} \frac{b}{2}} \Phi_{n}^{(k)} \right] + \sum_{k=1}^{2} \sum_{n=1}^{\infty} b_{n}^{(k)} \left[\frac{i}{\hbar} (p_{y} - p_{n,k}) e^{\frac{i}{\hbar} p_{n,k} \frac{b}{2}} \Phi_{n}^{(k)} \right] + \left(\frac{2i}{\hbar} p_{y} \right) A e^{-\frac{i}{\hbar} p_{y} \frac{b}{2}} y$$

$$(2.3.31) \quad F_D = \sum_{k=1}^{2} \sum_{n=1}^{\infty} a_n^{(k)} \left[-\frac{i}{\hbar} \left(p_y - p_{n,k} \right) e^{\frac{i}{\hbar} p_{n,k} \frac{b}{2}} \Phi_n^{(k)} \right] + \sum_{k=1}^{2} \sum_{n=1}^{\infty} b_n^{(k)} \left[-\frac{i}{\hbar} \left(p_y + p_{n,k} \right) e^{-\frac{i}{\hbar} p_{n,k} \frac{b}{2}} \Phi_n^{(k)} \right].$$

Finalmente.

$$(2.3.32) \qquad \left(\Phi_{m}^{(l)}, F_{U}\right) = \sum_{k=1}^{2} \sum_{n=1}^{\infty} a_{n}^{(k)} \left[\frac{i}{\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} p_{n,k} \frac{b}{2}} \left(\Phi_{m}^{(l)}, p_{y} \Phi_{n}^{(k)}\right) + \frac{i}{\hbar} p_{n,k} e^{-\frac{i}{\hbar} p_{n,k} \frac{b}{2}} \left(\Phi_{m}^{(l)}, \Phi_{n}^{(k)}\right)\right] + \\ + \sum_{k=1}^{2} \sum_{n=1}^{\infty} b_{n}^{(k)} \left[\frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p_{n,k} \frac{b}{2}} \left(\Phi_{m}^{(l)}, p_{y} \Phi_{n}^{(k)}\right) - \frac{i}{\hbar} p_{n,k} e^{\frac{i}{\hbar} p_{n,k} \frac{b}{2}} \left(\Phi_{m}^{(l)}, \Phi_{n}^{(k)}\right)\right] + \\ - \frac{2i}{\hbar} \left(\Phi_{m}^{(l)}, p_{y} A e^{-\frac{i}{\hbar} p_{y} \frac{b}{2}}\right) = 0 \qquad \forall m \in \mathbb{N}, l \in \{1, 2\}$$

У

$$(2.3.33) \qquad \left(\Phi_{m}^{(l)}, F_{D}\right) = \sum_{k=1}^{2} \sum_{n=1}^{\infty} a_{n}^{(k)} \left[-\frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p_{n,k} \frac{b}{2}} \left(\Phi_{m}^{(l)}, p_{y} \Phi_{n}^{(k)}\right) + \frac{i}{\hbar} p_{n,k} e^{\frac{i}{\hbar} p_{n,k} \frac{b}{2}} \left(\Phi_{m}^{(l)}, \Phi_{n}^{(k)}\right) \right] + \\ + \sum_{k=1}^{2} \sum_{n=1}^{\infty} b_{n}^{(k)} \left[-\frac{i}{\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} p_{n,k} \frac{b}{2}} \left(\Phi_{m}^{(l)}, p_{y} \Phi_{n}^{(k)}\right) - \frac{i}{\hbar} p_{n,k} e^{-\frac{i}{\hbar} p_{n,k} \frac{b}{2}} \left(\Phi_{m}^{(l)}, \Phi_{n}^{(k)}\right) \right] = \\ = 0 \qquad \forall m \in \mathbb{N}, \ l \in \{1, 2\}.$$

Por el teorema de Parseval-Plancherel y debido a la ortonormalidad de las funciones $\varphi_m^{(l)}(x)$ es claro que

$$\left(\Phi_m^{(l)}, \Phi_n^{(k)}\right) = \delta_{mn}\delta_{lk}.$$

Luego, podemos escribir de manera condensada (2.3.32) y (2.3.33):

(2.3.35)
$$\sum_{k=1}^{2} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_{mn}^{U(l,k)} a_n^{(k)} + \sum_{k=1}^{2} \sum_{n=1}^{\infty} \mu_{mn}^{U(l,k)} b_n^{(k)} = \gamma_m^{(l)} \quad m \in \mathbb{N}, \ l \in \{1,2\} \ \text{y}$$

(2.3.36)
$$\sum_{k=1}^{2} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_{mn}^{D(l,k)} a_n^{(k)} + \sum_{k=1}^{2} \sum_{n=1}^{\infty} \mu_{mn}^{D(l,k)} b_n^{(k)} = 0 \quad m \in \mathbb{N}, l \in \{1,2\},$$

donde,

$$\lambda_{mn}^{U(l,k)} = e^{-\frac{i}{\hbar}p_{n,k}\frac{b}{2}} \left(\Phi_m^{(l)}, p_y \Phi_n^{(k)}\right) + p_{m,l} e^{-\frac{i}{\hbar}p_{m,l}\frac{b}{2}} \delta_{mn} \delta_{lk},$$

(2.3.38)
$$\lambda_{mn}^{D(l,k)} = e^{\frac{i}{\hbar}p_{n,k}\frac{b}{2}} \left(\Phi_m^{(l)}, p_y \Phi_n^{(k)}\right) - p_{m,l} e^{\frac{i}{\hbar}p_{m,l}\frac{b}{2}} \delta_{mn} \delta_{lk},$$

⁸Al igual que en la sección anterior, obviamos la dependencia en p_x el resto de esta sección.

(2.3.39)
$$\mu_{mn}^{U(l,k)} = e^{\frac{i}{\hbar}p_{n,k}\frac{b}{2}} \left(\Phi_m^{(l)}, p_y \Phi_n^{(k)}\right) - p_{m,l} e^{\frac{i}{\hbar}p_{m,l}\frac{b}{2}} \delta_{mn} \delta_{lk},$$

$$\mu_{mn}^{D(l,k)} = e^{-\frac{i}{\hbar}p_{n,k}\frac{b}{2}} \left(\Phi_m^{(l)}, p_y \Phi_n^{(k)}\right) + p_{m,l} e^{-\frac{i}{\hbar}p_{m,l}\frac{b}{2}} \delta_{mn} \delta_{lk}$$
 y

(2.3.41)
$$\gamma_m^{(l)} = 2\left(\Phi_m^{(l)}, p_y A e^{-\frac{i}{\hbar}p_y \frac{b}{2}}\right).$$

Note que, como era de esperar, hemos obtenido un sistema de ecuaciones infinito con infinitas incógnitas $(a_m^{(l)}$'s y $b_m^{(l)}$'s). Para cada l hay dos ecuaciones y por cada m hay una más. Como $m \in \mathbb{N}$ entonces tenemos una infinidad de ecuaciones. En principio, de estas ecuaciones deberíamos ser capaces de calcular $a_m^{(l)}$ y $b_m^{(l)}$, para todo m y l en los naturales. Como antes, será necesario truncar las matrices asociadas a las ecuaciones para obtener un resultado numérico. En que punto deben truncarse es el problema más difícil en este trabajo de tesis, pues los cálculos no siempre son del todo inmediatos. Hay que monitorear que el resultado va convergiendo y esto hace el tiempo de computo aún más largo (sobre todo en este caso de la doble rendija).

Se debe notar que ahora tenemos dos tipos de integrales:

$$\begin{array}{ll} (2.3.42) & \left(\Phi_m^{(l)}, p_y \Phi_n^{(l)}\right) & l \in \{1,2\} & \text{(integral de acoplamiento entre modos de una misma rendija)} \\ y \\ (2.3.43) & \left(\Phi_m^{(l)}, p_y \Phi_n^{(k)}\right) & l,k \in \{1,2\} \ l \neq k & \text{(integral de acoplamiento entre modos de las dos rendijas).} \end{array}$$

Las integrales del tipo (2.3.42) son las mismas que se calculan para el caso de una rendija (lo mismo para (2.3.41)). Sin embargo, las integrales del tipo (2.3.43) obviamente no habían aparecido antes. Aquí se mezclan la base $\Phi_m^{(1)}$ de la primera rendija con la base $\Phi_m^{(2)}$ de la segunda rendija (y viceversa) debido al factor p_y . Así pues, físicamente podríamos interpretar estas integrales como interferencias entre rendijas.

En esta tesis trabajamos el caso particular en el que las rendijas son igual de largas, es decir, $a_1 = a_2$. En el apéndice A demostramos que en general para dos rendijas,

Estas integrales son calculadas numéricamente usando una distorsión de contorno adecuada, semejante a la mostrada en la sección anterior.

CAPíTULO 3

Resultados numéricos

3.1. Resultados de una rendija

Este capítulo pone a prueba la solución matemática rigurosa al problema de una rendija. Como ya habíamos mencionado, consideraremos un paquete de ondas incidente con forma gaussiana. Daremos la libertad de que este paquete incida con ángulo α (oblicuamente) respecto a un eje perpendicular al eje x (vea la figura 3.1.1). En general nos limitaremos a una pared con una rendija sin espesor, es decir, b=0. La rendija se coloca en la posición x=0 y se extiende hasta x=a. Todas las distancias están en unidades del ancho de la rendija, por lo cual siempre omitiremos sus unidades. Nos restringiremos a longitudes de onda comparables con el tamaño de la rendija.

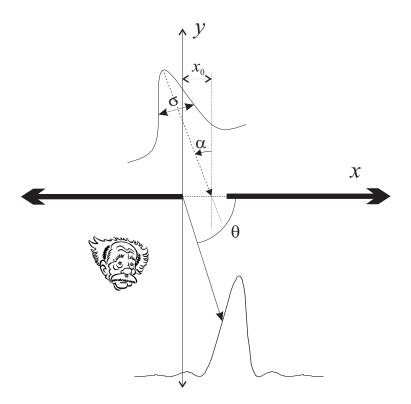


FIGURA 3.1.1. Arreglo experimental. Note que el eje vertical desde donde se mide α , ángulo de incidencia, puede estar localizado en cualquier punto $x=x_0$. θ se utiliza para describir el patrón de difracción.

Para ser consistentes con la condición (2.2.20), estrictamente para un paquete gaussiano de ancho σ incidiendo sobre la pared con un acercamiento x_0 y un ángulo α , debe tenerse¹:

$$A(p_x) = \begin{cases} \frac{\sigma}{2\sqrt{2\hbar}} \left(\cos \alpha + \frac{p_x}{p_y} \sin \alpha \right) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \left(p_x x_0 - p_y \frac{b}{2} \right) \right] \exp\left[-\left(p_x \cos \alpha - p_y \sin \alpha \right)^2 \frac{\sigma^2}{16\hbar^2} \right] & |p_x| \le p, \\ 0 & |p_x| > p. \end{cases}$$

Es claro que (2.2.20) restringe considerablemente nuestra metodología ya que, luego de aplicar la transformada inversa de Fourier a $A(p_x)$, no recuperaremos la gaussiana incidente. Sin embargo, no todo está perdido si pedimos que los parámetros σ y p (o equivalentemente λ) sean tales que la región cortada de la (casi) gaussiana $A(p_x)$ sea insignificante. Es decir, podemos ignorar el corte exigiendo que la desviación estándar (digamos, Σ) de esta gaussiana (poniendo $x_0=0$, b=0 y $\alpha=0$, para simplificar) cumpla con ser menor que algunas fracciones del momento p. Por ejemplo, es fácil demostrar que si queremos recuperar el 99.7300204% del área se debe cumplir que $\frac{h}{\lambda}=p\geq 3\Sigma=3\frac{\sqrt{2}h}{\pi\sigma}$ y luego $\frac{\lambda}{\sigma}\leq 0.74048\approx \frac{3}{4}$. Podríamos ser más exigentes y pedir recuperar al menos el 99.9999205% del área de la gaussiana, lo que implica $\frac{\sigma}{\lambda}\geq \frac{20}{9}$. Para asegurar que nuestros resultados son confiables manejaremos σ/λ cumpliendo al menos la última desigualdad.

Del paquete de ondas transmitido ψ_D en la ecuación (2.2.45) y el paquete de ondas incidente ψ_i de la primera integral de la ecuación (2.2.43), podemos calcular el coeficiente de transmisión,

(3.1.2)
$$T = \lim_{\rho \to \infty} \frac{\int_{\theta=0}^{\pi} \int_{z=0}^{1} \overrightarrow{J_t} \cdot \hat{\rho} \rho d\theta dz}{\int_{x=-\infty}^{\infty} \int_{z=0}^{1} \overrightarrow{J_i} (x, \frac{b}{2}) \cdot (-\hat{y}) dx dz} =: \int_{0}^{\pi} I(\theta) d\theta,$$

donde $\overrightarrow{J_t} := \frac{1}{m} \text{Re} \left[\psi_D^{\star} \left(\frac{h}{i} \right) \nabla \psi_D \right]$ es el flujo de probabilidad transmitido calculado en coordenadas cilíndricas (ρ, θ, z) , como se sugiere en la figura 3.1.1. $\overrightarrow{J_i}$ se deja en coordenadas cartesianas. Además identificamos $I(\theta)$ como la distribución angular del flujo de probabilidad en infinito normalizada al flujo de probabilidad incidente. De manera análoga se calcula el coeficiente de reflexión.

3.1.1. Distribución angular del flujo de probabilidad transmitido en infinito normalizado al incidente. A continuación presentamos los resultados del cálculo de la distribución angular del flujo de probabilidad transmitido en infinito normalizada al flujo de probabilidad incidente (para abreviar, DAFPTI) o, simplemente, el patrón de difracción, como se suele llamar en óptica. La DAFPTI da información acerca del número relativo de partículas que se transmiten por la rendija y se desvían en una dirección que llamamos θ cuando uno realiza las mediciones muy lejos de la rendija.

Cuando se hace un experimento de difracción uno por lo general colima el haz de partículas incidente. Esta colimación la hemos considerado al escoger un paquete de ondas incidente gaussiano con ancho σ . Veamos qué efecto tiene la colimación sobre los patrones de difracción en la figura 3.1.2. Como era de esperarse, la cantidad de partículas que se transmite en cada dirección disminuye cuando el ancho σ aumenta (esto se refleja en la disminución del coeficiente de transmisión T). En otras palabras, mientras más dispersas estén las partículas incidentes, menos pasarán a través de la rendija. Así, como era natural, una mala colimación lleva a un patrón de difracción (en y < 0) poco nítido. Sin embargo, la forma de los patrones de difracción no cambia en ninguna dirección, de manera que todos los patrones pueden coincidir (multiplicando por un factor adecuado a cada uno de ellos) en una sola gráfica.

¹La función ψ_i en (2.2.89) debe ser rotada adecuadamente α grados. Sin embargo, esto en la práctica es complicado y una forma más sencilla de obtener (3.1.1) es directamente rotando la amplitud espectral calculada en el apéndice A, ecuación (A.1.10), como se especifica (por ejemplo) en [50].

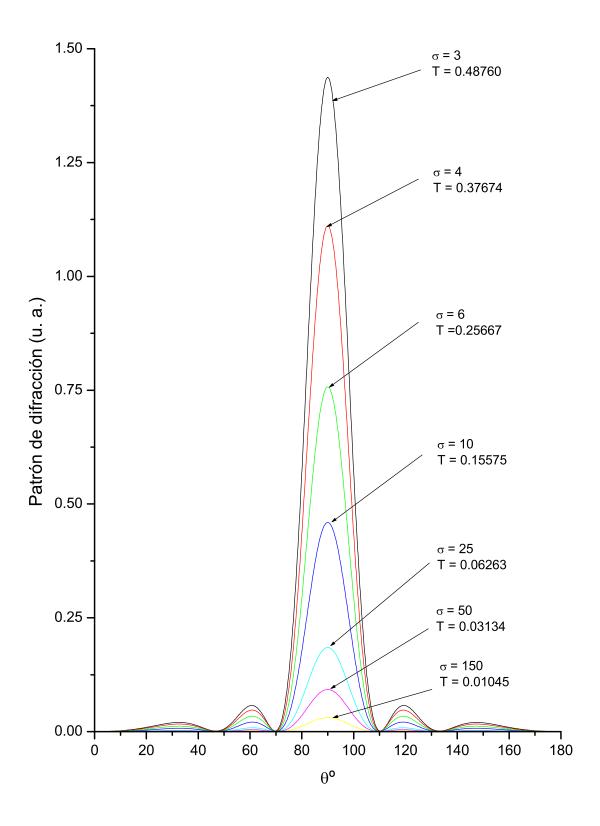


FIGURA 3.1.2. [1 rendija] Patrones de difracción con diferente ancho σ del paquete gaussiano incidente calculados con 15 modos en la base. Se ha puesto $a=1,\,\lambda=0.3333,\,x_0=0.5$ y $\alpha=0.$ T es el coeficiente de transmisión y R el de transmisión. En todas las gráficas $|T+R-1|<5\times10^{-6}$.

¿Qué pasa si el paquete gaussiano incidente no está centrado a la rendija? Recordemos que la gaussiana incide a una distancia x_0 del borde de la rendija (localizado en x=0). Hacemos una gráfica comparativa, ahora para varios acercamientos x_0 's de la onda incidente (vea la figura 3.1.3a). Existe una disminución rápida en el número de partículas transmitidas entre menos centrado a la rendija esté el paquete incidente. También se observa una asimetría en los patrones de difracción (vea la figura 3.1.3b-e). Específicamente, cuanto mayor sea x_0 (> 1), mayor será el número de partículas transmitidas que tenderá a dispersarse a x's negativos o θ 's grandes (90° < θ < 180°). Lo contrario debe ocurrir para x_0 < 1. Por ejemplo, cuando $x_0 = 4.5$ la mayoría de las partículas transmitidas se desviarán a $\theta \approx 91.2^\circ$, es decir, a 1.2° de la dirección normal a la rendija. Podríamos imaginar que existe un efecto de "rebote" de las partículas por el borde (de la rendija) sobre el que inciden más de ellas.

Hagamos una comparación de los patrones de difracción de acuerdo a la energía de la partícula incidente. Recordemos que $E=\frac{p^2}{2m}=\frac{h^2\lambda^{-2}}{2m}$, es decir, una longitud de onda pequeña significa una energía grande, y viceversa. Observe la figura 3.1.4. Cuando la longitud de onda es grande (en nuestro caso, muy próxima al tamaño de la rendija), las partículas son dispersadas en todas direcciones con mayor probabilidad en el centro (es decir, alrededor de $\theta=90^\circ$, que es la dirección perpendicular a la rendija). A medida que se hace pequeña la longitud de onda se empieza a notar una serie de máximos y mínimos en el patrón que se acercan cada vez más al máximo principal. Es decir, en el caso de una rendija para ver los máximos y mínimos alrededor de $\theta=90^\circ$ se debe tener una longitud de onda suficientemente pequeña respecto al ancho de la rendija². Por supuesto, los patrones de difracción son simétricos pues el paquete incide siempre centrado a la rendija.

Un efecto parecido a disminuir la longitud de onda ocurre cuando aumentamos el tamaño de la rendija (vea la figura 3.1.5). Imaginemos una rendija cuyo tamaño puede ser variado arbitrariamente. Cuando la rendija se hace pequeña las partículas tenderán a dispersarse en todas direcciones, de forma simétrica y con mayor probabilidad en el centro. En cambio, hacer grande la rendija evita que las partículas se desvíen tanto a ángulos grandes pero además surge de nuevo el patrón de máximos y mínimos típico de la óptica (recuerde que nos estamos restringiendo a tamaños de la rendija comparables con la longitud de onda). Tenemos una relación λ pequeña \sim a grande, y λ grande \sim a pequeña, donde " \sim " la interpretaremos como "es equivalente a tener".

Cuando la gaussiana incidente hace un ángulo α con un eje paralelo al eje y, digamos en $x=x_0=0.5$, se observa (figura 3.1.6) un desplazamiento del patrón de difracción hacia ángulos θ pequeños a medida que α aumenta³, y por otro lado, una disminución leve del coeficiente de transmisión. De forma tal que las partículas atravesaran menos la rendija a medida que incidan más rasantemente y tenderán a irse hacia ángulos θ pequeños. Un hecho notable es que la diferencia entre el máximo principal (el más alto del patrón de difracción) y el máximo adyacente o secundario, del lado de θ 's grandes, disminuye entre más inclinado llegue el paquete de ondas. Por ejemplo, con los datos de la figura 3.1.6 se obtiene que el

 $^{^2}$ No tan pequeña o terminaremos en el caso "clásico" de partículas con momento muy grande que casi no se desvían de su trayectoria rectilínea al pasar por la rendija (vea los resultados del capítulo 4). En este caso el máximo principal y los máximos secundarios del patrón de difracción están muy juntos y, por tanto, todas las partículas están muy localizadas alrededor de $\theta = 90^{\circ}$. En palabras de L. Ballentine (vea [12] página 400) "estrictamente hablando, la mecánica cuántica no converge a la mecánica clásica, sino que en el límite clásico el fenómeno cuántico característico como las franjas de interferencia llegan a estar tan finamente espaciadas como para ser prácticamente indetectables". Como será evidente cuando estudiemos difracción por dos rendijas, esta frase de Ballentine podría estar sobresimplificada (vea, por ejemplo, la figura 3.2.2).

³Limitamos la discusión a los patrones de difracción con α 's positivos menores a 45° por la evidente simetría que existe con los patrones con α 's entre 315° y 360° (que son equivalentes con $-\alpha$, con $\alpha \in (0^{\circ}, 45^{\circ})$. Por otro lado, no hemos graficado patrones de difracción con α en el intervalo (45°, 90°) por cuestiones de presición numérica que tiene por efecto que el patrón de difracción se estacione (no se siga recorriendo).

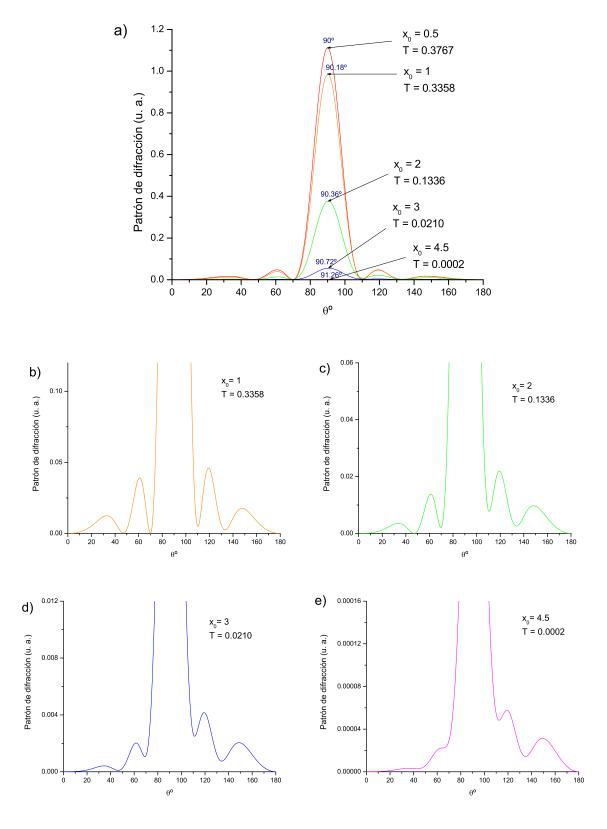


FIGURA 3.1.3. [1 rendija] a) Patrones de difracción para diferentes acercamientos x_0 del paquete gaussiano incidente calculados con 15 modos en la base. Se ha puesto $a=1, \lambda=0.3333, \sigma=4$ y $\alpha=0$. En todas las gráficas $|T+R-1|<4\times10^{-5}$. b) - e) Se hace una ampliación individual de los patrones en a) para observar la asimetría.

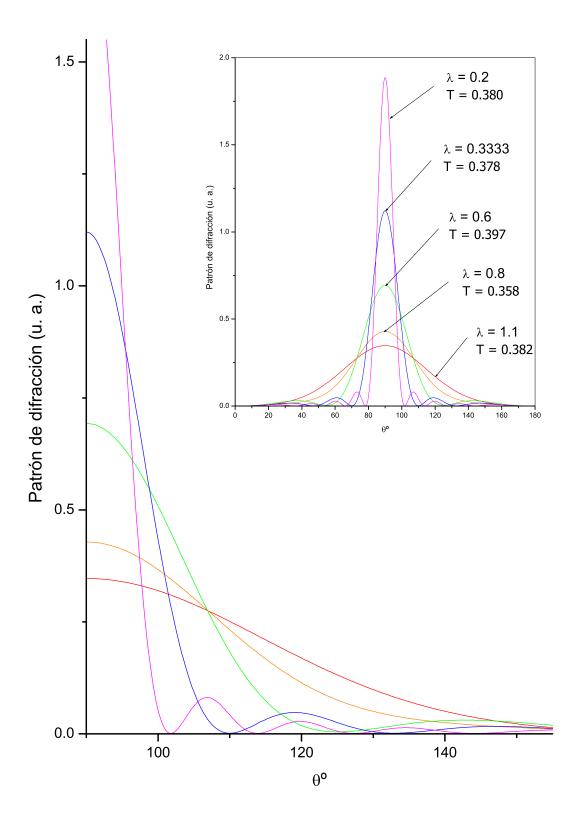


FIGURA 3.1.4. [1 rendija] Patrones de difracción de partículas incidiendo con diferente longitud de onda λ calculados con 15 modos en la base. Se ha puesto $a=1,\,\sigma=4,\,x_0=0.5$ y $\alpha=0$. En todas las gráficas $|T+R-1|<4\times10^{-5}$.

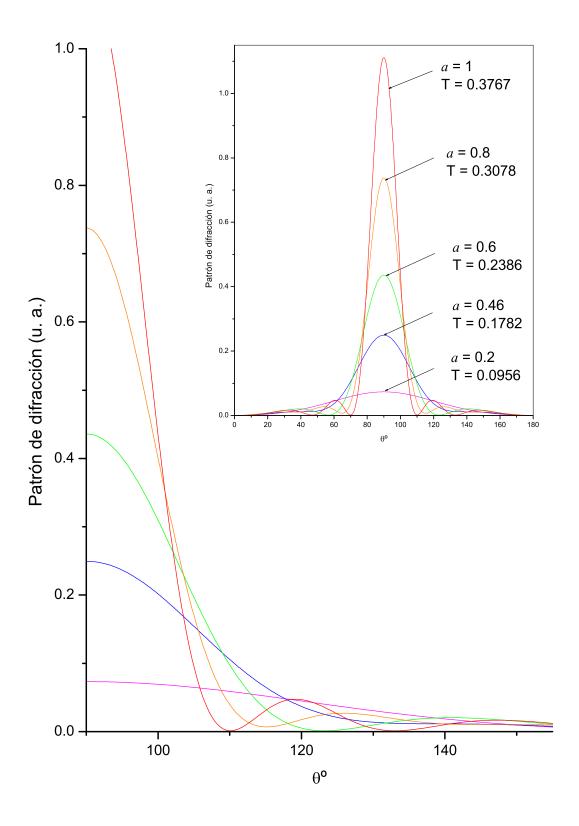


FIGURA 3.1.5. [1 rendija] Patrones de difracción de partículas incidiendo sobre una rendija de ancho variable a calculados con 15 modos en la base. Se ha puesto $\sigma=4,\,\lambda=0.3333,\,x_0=0.5$ y $\alpha=0$. En todas las gráficas $|T+R-1|<3\times10^{-5}$.

máximo principal cuando $\alpha=1^{\circ}$ está unas 24 veces más arriba del primer máximo secundario. En cambio, cuando $\alpha=30^{\circ}$ el máximo principal está alrededor de 18 veces por encima del máximo adyacente. Así, con suficiente paciencia (recuerde que estamos en una situación en la que mandamos partículas una por una, desconectadas causalmente) se podría observar de manera más clara el comportamiento ondulatorio de la materia lanzando partículas más o menos rasantes a la rendija.

3.1.2. Distribuciones de probabilidad en la posición. En la sección anterior hemos estudiado la forma en que se distribuyen las partículas difractadas muy lejos de la rendija (en la parte trasmitida). Ahora nos interesa conocer cuál es el comportamiento a una distancia arbitraria de la rendija. Para ello hemos calculado la distribución de probabilidad (el modulo al cuadrado de la función de onda) en varias regiones del espacio y los resultados los presentamos a continuación.

Empezaremos por mostrar el comportamiento general de la distribución de probabilidad en el espacio. En la figura 3.1.7a mostramos la gaussiana que incide (paquete incidente) y que corresponde al módulo al cuadrado de la primera integral en la ecuación 2.2.43 en la página 27. Las mallas de los incisos b-d de esta misma figura muestran la densidad de probabilidad total que incluye los términos incidente y reflejado de la ecuación (2.2.43) y el transmitido de (2.2.45). La difracción puede llegar a ser muy complicada en ciertas regiones: suficientemente lejos de la rendija (tanto en la región incidente como en la transmitida) se observa el patrón de máximos y mínimos que ya habíamos notado en la sección anterior; sin embargo, de la figura 3.1.8 es claro que en la región cercana a la rendija el comportamiento es totalmente complejo.

A pesar de lo llamativas que son las gráficas en las figuras 3.1.7 y 3.1.8, no sirven para un estudio cuidadoso de la difracción. Una mejor opción a las gráficas tridimensionales son las gráficas bidimensionales de densidad de contornos (vea la figura 3.1.9). Por defecto el sombreado de las gráficas de densidad de contornos es tal que entre más alta sea la función esta se ve más clara.

La interferencia entre la onda incidente y la onda reflejada hace que la densidad de probabilidad en la región $y \ge 0$ sea bastante complicada. Como la onda incidente en principio la conocemos bien, sería interesante observar sólo la contribución a la densidad de probabilidad de la onda reflejada sin que esta interfiera con la incidente y sin considerar el término de reflexión especular⁴

$$(3.1.3) -\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} A(p_x) e^{-\frac{i}{\hbar}p_y b} e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y)} \mathrm{d}p_x.$$

Si además incluímos la contribución de la onda trasmitida en $y \le 0$, formamos lo que llamaremos difracción pura: el módulo al cuadrado del paquete de ondas reflejado sin el término de reflexión especular en $y \ge 0$ y el módulo al cuadrado del paquete de ondas trasmitido en $y \le 0$. La difracción pura se muestra en las gráficas de densidad de la figura 3.1.10, tanto para la región lejana como para la cercana a la rendija.

Finalmente, un estudio más detallado de cómo "evoluciona" la densidad de probabilidad, haciendo cortes en y, y sólo en la parte transmitida, se encuentra en la figura 3.1.11.

⁴Note que este término, llamado de reflexión especular y que aparece en la segunda integral de (2.2.43) a través del último término de $B(p_x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-\frac{i}{\hbar}(p_{y_n} + p_y)\frac{b}{2}} \Phi_n(p_x) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n e^{\frac{i}{\hbar}(p_{y_n} - p_y)\frac{b}{2}} \Phi_n(p_x) - A(p_x) e^{-\frac{i}{\hbar}p_y}$ en la ecuación (2.2.51), se anula idénticamente con el paquete de ondas incidente cuando y = b/2. El bloque restante en ψ_U , llamado de difracción pura en reflexión, también se anula en las paredes. Observe además, que el término de reflexión especular aparece siempre, aún sin la presencia de la rendija.

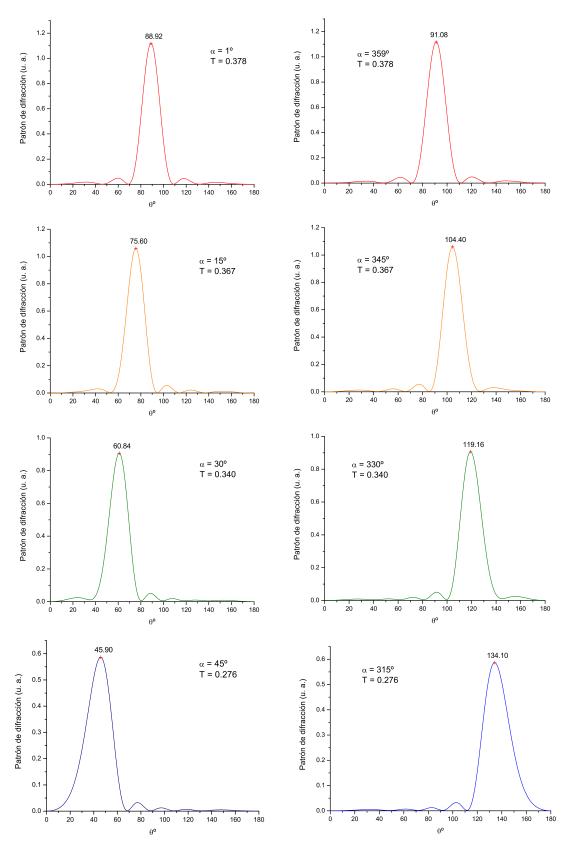


FIGURA 3.1.6. [1 rendija] Patrones de difracción de paquetes gaussianos con diferente ángulo de incidencia α . Se ha puesto $a=1,\ \sigma=4,\ \lambda=0.3333$ y $x_0=0.5$. Se han fijado 25 modos en la base para el cálculo. En todas las gráficas $|T+R-1|<10^{-4}$.

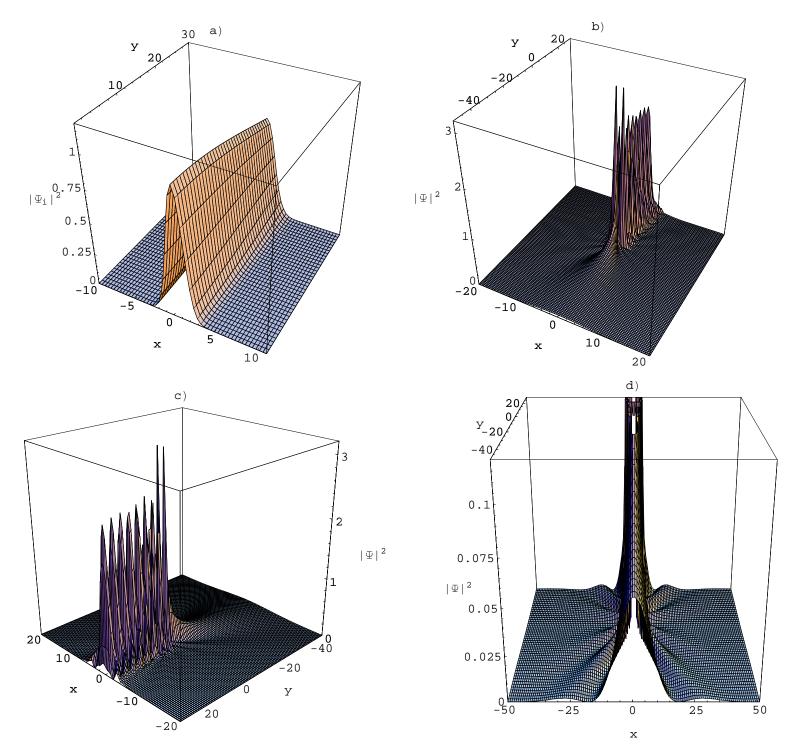


FIGURA 3.1.7. [1 rendija] Comportamiento general de la densidad de probabilidad en la posición por una rendija, calculada con 15 modos en la base (recuerde que la rendija está en $x \in [0,a]$ y y=0, y la región trasmitida corresponde a y negativo). En a) se muestra la gaussiana incidente (el modulo al cuadrado de la primera integral en la ecuación 2.2.43 en la página 27). En b) y c) mostramos la densidad de probabilidad total (incluye la parte incidente y la reflejada en $y \ge 0$) desde dos distintos ángulos. En d) amplificamos en el eje z y ampliamos el rango en el eje x. Se ha puesto a=1, $\sigma=4$, $\lambda=0.3333$, $x_0=0.5$ y $\alpha=0$. En este caso T=0.3767 y R=0.6233.

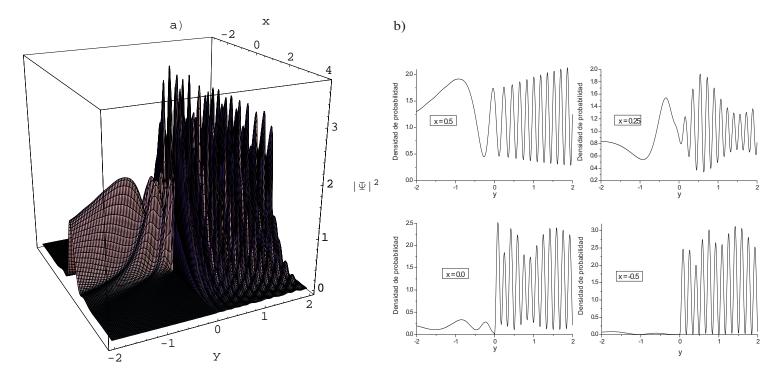


FIGURA 3.1.8. [1 rendija] Densidad de probabilidad total en la región cercana a la rendija. Utilizamos 20 modos en la base. a) Malla vista de perfil y b) cortes a x's fijos de la malla en a). Se ha puesto $a=1, \, \sigma=4, \, \lambda=0.3333, \, x_0=0.5$ y $\alpha=0.$ T=0.3771 y T=0.6229.

3.2. Resultados de dos rendijas

Esta sección pone a prueba los resultados de la solución matemática rigurosa a la difracción por dos rendijas. Como antes consideraremos un paquete de ondas de forma gaussiana incidiendo oblicuamente con ángulo α (la única modificación a la figura 3.1.1 es la adición de una rendija más) y la pared con rendijas sin espesor (b=0). La primer rendija se coloca en la posición x=0 y se extiende hasta x=a, y la segunda de x=a+d a x=2a+d (las dos rendijas son del mismo tamaño a). Todas las distancias están en unidades del ancho de la rendija.

3.2.1. Distribución angular del flujo de probabilidad transmitido en infinito normalizado al incidente. Veamos qué efecto tiene la colimación sobre los patrones de difracción en la figura 3.2.1. Hemos centrado el haz justo entre las dos rendijas (de ancho a=1 y separadas d=2). Empezamos por establecer $\sigma=2$, donde el paquete prácticamente incide en la pared entre las dos rendijas. Incrementando σ (figura 3.2.1a), el paquete empieza a cubrir la región de las rendijas y claramente la transmisión aumenta, como debe ser. De acuerdo a nuestros cálculos (con $\lambda=0.3333$, $\alpha=0$) cerca de $\sigma=6$ la trasmisión llega a un máximo (figura 3.2.1b). Como en el caso de una rendija, la transmisión disminuye porque simplemente tenemos una mala colimación. Además, existe otro fenómeno interesante: observando cuidadosamente los máximos secundarios, vemos que en la primera etapa en que la transmisión aumenta, el patrón de difracción se compacta (como lo indican las líneas guía centradas en los máximos del patrón de máxima transmisión con $\sigma=6$); es decir, los máximos secundarios se acercan al centro mientras σ

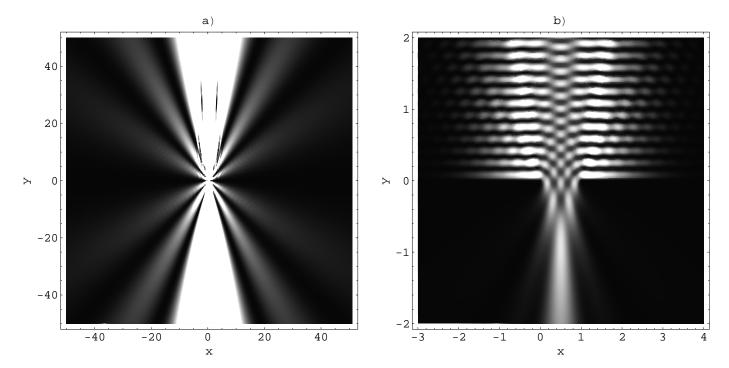


FIGURA 3.1.9. [1 rendija] Densidad de probabilidad total por una rendija calculada con a) 15 y b) 20 modos en la base. La gráfica de densidad de contornos a) resume la figura 3.1.7 (región lejana) y b) la figura 3.1.8 (región cercana). Se ha puesto $a=1,\,\sigma=4,\,\lambda=0.3333,\,x_0=0.5$ y $\alpha=0$.

aumenta. Cuando llegamos al tope de transmisión, cerca de $\sigma = 6$, los máximos secundarios dejan de recorrerse y la forma de los patrones de difracción ya no varía en la dirección angular⁵.

Como ahora la colimación sí tiene un efecto visible sobre la forma angular del patrón de difracción, sería interesante observar lo que pasa si centramos el haz justo a la mitad de una sola rendija, digamos, de la primera⁶. Cuando el paquete cubre apenas a la primer rendija el patrón de difracción no parece presentar máximos y mínimos secundarios. Éstos surgen poco a poco cuando hacemos grande el ancho del paquete y se empieza a cubrir cada vez más a la segunda rendija. La "evolución" se muestra claramente en la figura 3.2.2 y es como si las franjas de interferencia hubiesen estado siempre ahí, ocultas o muy matizadas, y al momento de agrandar el ancho del haz (o empeorar la colimación) se dejaran ver claramente (recuerde que $\sigma \to \infty$ es el límite de onda plana).

A esta misma configuración podríamos introducir una variable más. Nos preguntamos en este momento cuál es efecto de la separación entre las rendijas, específicamente en el coeficiente de transmisión. Por supuesto cada gráfico de la figura 3.2.2 debe modificarse a medida que cambiamos d. Un ejemplo de esta situación está en la figura 3.2.3, donde el patrón de difracción "evoluciona" desde uno de dos rendijas muy

 $^{^5}$ Observando cuidadosamente, podría notar que las líneas guía de la figura 3.2.1b no coinciden exactamente con los máximos secundarios de los patrones de difracción con $\sigma \ge 7$ pues el patrón con $\sigma = 6$ no es fielmente el de máxima transmisión (y con el cual sí coincidirían). De hecho, en nuestro caso, este ultimo debe estar entre σ igual a 6 y 6.5.

⁶Note la diferencia con el caso anterior en el que el haz estaba centrado entre la dos rendijas. Estos resultados (figuras 3.2.2 y 3.2.4) fueron mostrados en el XLVIII Congreso Nacional de Física que se realizó en la ciudad de Guadalajara, Jalisco, en las instalaciones del Centro Universitario de Ciencias Exactas de la Universidad de Guadalajara (UdeG) del 17 al 21 de octubre de 2005. Allí utilizamos una longitud de onda de 0.9 el ancho de la rendija.

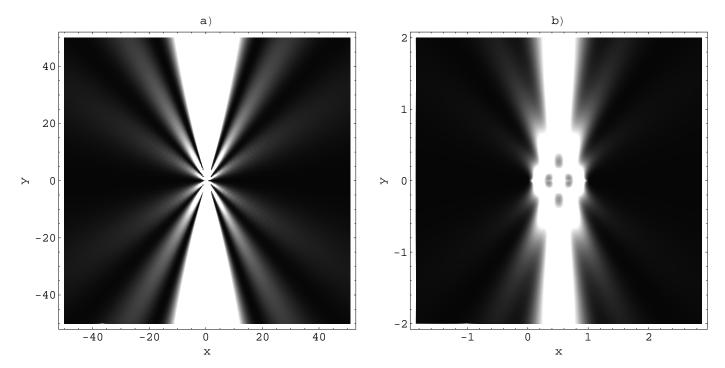


FIGURA 3.1.10. [1 rendija] Difracción pura generada por una rendija y una gassiana incidente. Se utilizan a) 15 (región lejana) y b) 20 (región cercana) modos en la base. La difracción pura ignora la contribución del paquete de ondas incidente, su inteferencia con el paquete de ondas reflejado y el término de reflexión especular a la distribución de probabilidad en $y \ge 0$. Se ha puesto $a=1, \ \sigma=4, \ \lambda=0.3333, \ x_0=0.5$ y $\alpha=0$.

pegadas ⁷ hasta uno prácticamente de una rendija simple de ancho a=1 (en este ejemplo esto es evidente ya con d=8, pero estrictamente esto sucede cuando $d\to\infty$).

Pero ahora nos interesa lo que sucede con el coeficiente de transmisión y el resultado es el de la figura 3.2.4. El coeficiente de transmisión decae rápidamente a medida que la segunda rendija se aleja (termina siendo el de una rendija de ancho a=1 cuando está suficientemente lejos). Pero sucede un fenómeno por demás interesante cuando hacemos el ancho del paquete grande: la gráfica de T contra d empieza a oscilar con una longitud de onda fija, digamos λ' . En el límite de onda plana ($\sigma \to \infty$, pero en nuestro caso $\sigma = 300$) se hace evidente que esta longitud de onda es precisamente la de la onda incidente: $\lambda' = \lambda = 0.9$.

En la figura 3.2.5 mostramos cómo se modifica el patrón de difracción cuando variamos solo el acercamiento del haz gaussiano. A medida que el centro del haz se aleja del punto medio entre las dos rendijas, los máximos y mínimos del patrón de difracción se difuminan. Es claro también, como en el caso de una sola rendija, que debe haber una asimetría con respecto a $\theta = 90^{\circ}$, una disminución en el coeficiente de transmisión y una simetría de espejo entre los patrones cuya onda incide a la misma distancia respecto al centro entre las dos rendijas.

La figura 3.2.6 muestra el comportamiento con λ variable, a la izquierda el haz incidiendo justo entre las dos rendijas y a la derecha en medio de la primer rendija. Como ya habíamos mencionado antes, entre

⁷Se podría pensar que esta configuración equivale a una rendija simple de ancho a=2 pues la separación entre rendijas es d=0. Sin embargo, en la solución rigurosa del problema hemos introducido como condición de frontera que la onda se anulara en la región entre las dos rendijas (barrera de potencial de altura infinita y ancho d). Así, aunque d=0, en realidad existe un alambre muy fino entre rendijas. Estrictamente, esto no es del todo cierto si el potencial es modelado en esta región de interés como una función $\delta(x=a)$ y en donde la posible discontinuidad de la derivada con respecto a x podría generar como consecuencia tunelamiento entre las dos rendijas.

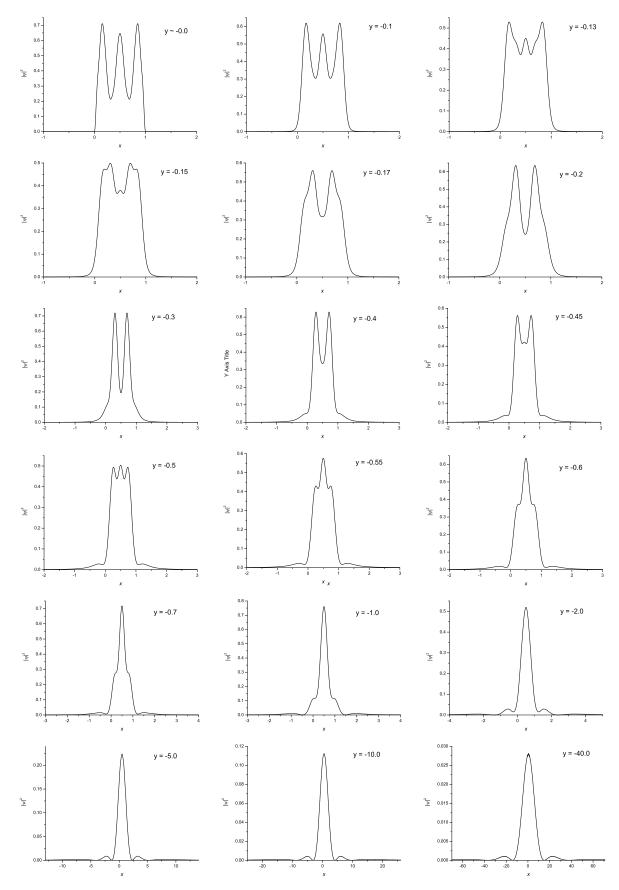


FIGURA 3.1.11. [1 rendija] Densidad de probabilidad en x para varios y, fijando 20 modos en la base, $a=1,\,\sigma=4,\,\lambda=0.3333,\,x_0=0.5$ y $\alpha=0.\,T=0.3771$ y |T-R-1|<5x10⁻⁵.

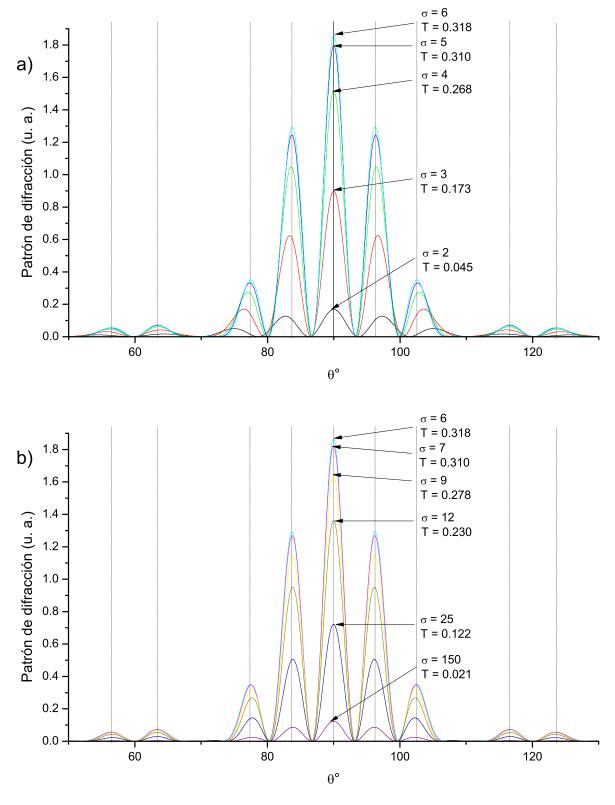


FIGURA 3.2.1. [2 rendijas] Patrones de difracción con diferente ancho σ del paquete gaussiano incidente calculados con 25 modos en la base. Se ha puesto $a_1=a_2=a=1$, $\lambda=0.3333,\ d=2,\ x_0=2$ y $\alpha=0$. En todas las gráficas $|T+R-1|<10^{-5}$.

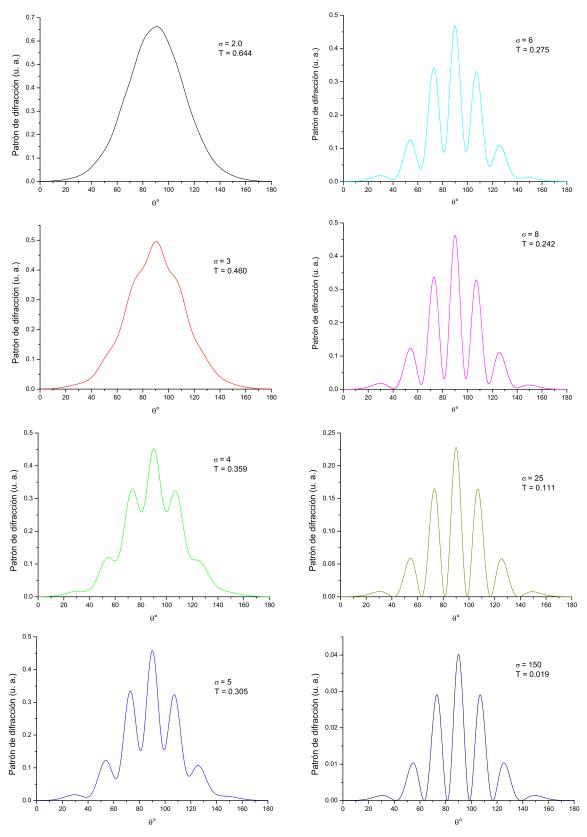


FIGURA 3.2.2. [2 rendijas] Patrones de difracción con diferente ancho σ del paquete gaussiano incidente calculados con 15 modos en la base. Se ha puesto $a=1,~\lambda=0.9,~d=2,~x_0=0.5$ y $\alpha=0$. En todas las gráficas |T+R-1|<2x10⁻⁵.

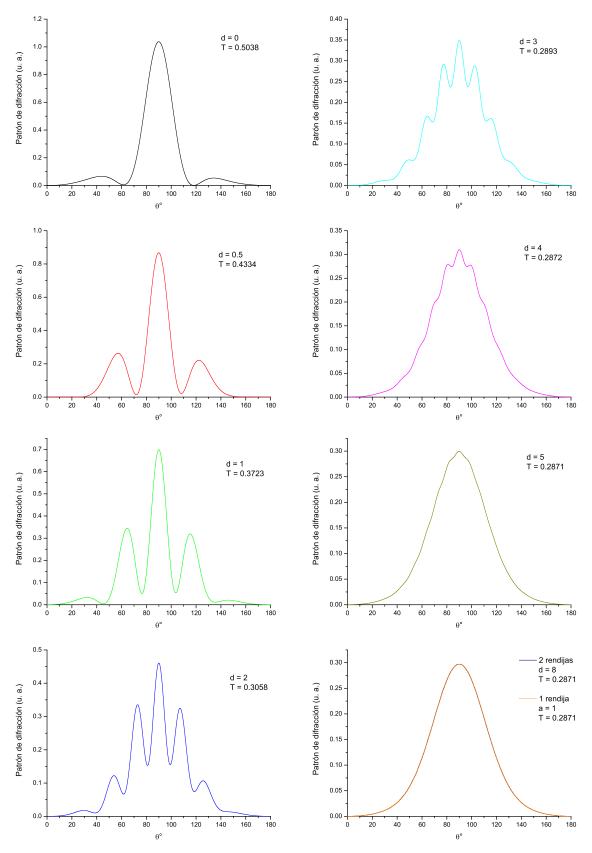


FIGURA 3.2.3. [2 rendijas] Patrones de difracción con diferente separación entre rendijas d calculados con 25 modos en la base. Se ha puesto $a=1,\ \lambda=0.9,\ \sigma=5,\ x_0=0.5$ y $\alpha=0$. En todas las gráficas |T+R-1|<3x 10^{-6} .

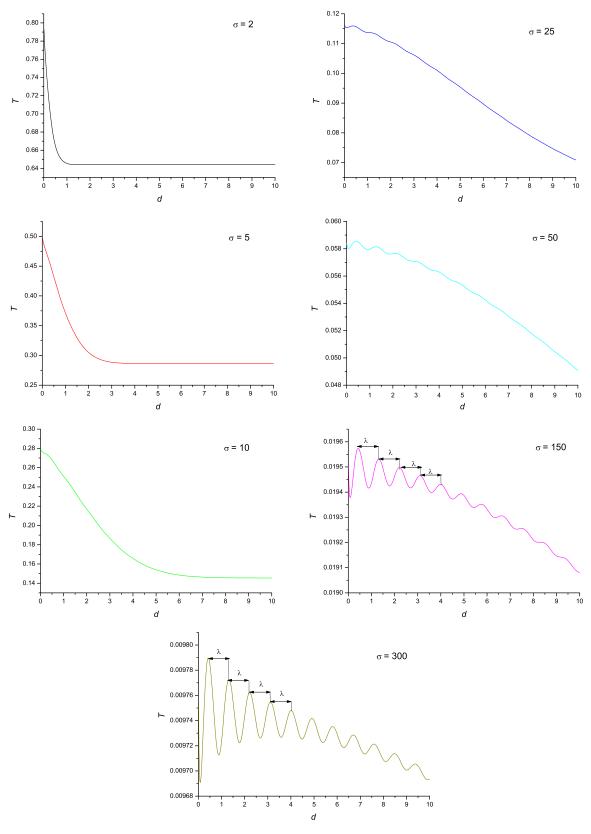


FIGURA 3.2.4. [2 rendijas] Variación del coeficiente de transmisión T con la separación d. Cada gráfica corresponde a un ancho del paquete gaussiano incidente diferente. Se han utilizado 15 modos en la base, $a=1,\,\lambda=0.9,\,x_0=0.5$ y $\alpha=0$.

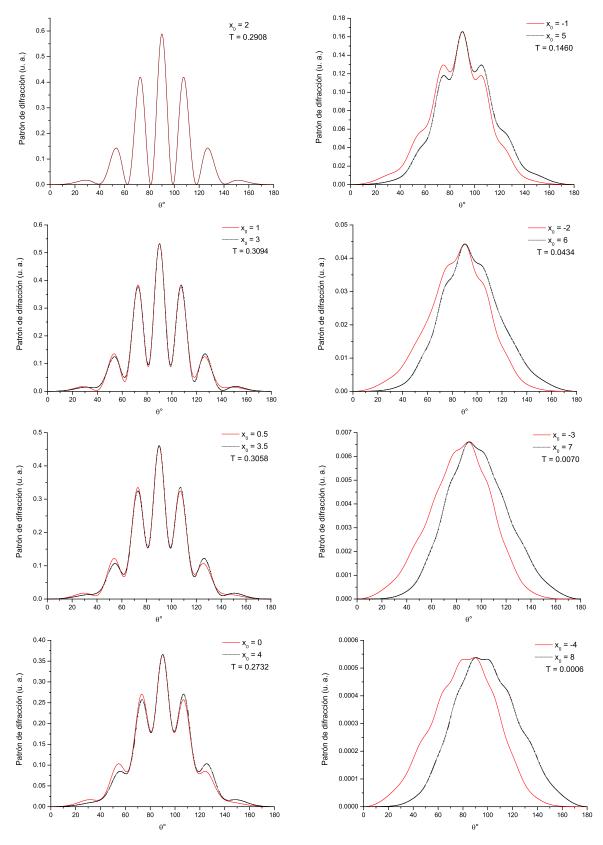


FIGURA 3.2.5. [2 rendijas] Patrones de difracción con diferente acercamiento x_0 del paquete gaussiano incidente calculados con 25 modos en la base. Se ha puesto $a=1,\ \lambda=0.9,\ \sigma=5,\ d=2$ y $\alpha=0$. En todas las gráficas |T+R-1|<8x 10^{-6} .

más pequeña sea la longitud de onda, más comprimido el patrón de difracción alrededor de 90°. La leve asimetría en los patrones de la derecha en la figura 3.2.6 se debe a que el haz no incide exactamente en el centro del sistema.

Finalmente hagamos un estudio de los patrones de difracción cuando el ángulo de incidencia α es variable. Tanto para $x_0=2$ como para $x_0=0.5$ (figuras 3.2.7 y 3.2.8, respectivamente) tenemos un corrimiento y asimetrías en el patrón de difracción tal y como lo observamos para una rendija. Para $x_0=2$, los patrones donde la onda incide con ángulo α y 360 – α son un espejo uno del otro (lado izquierdo y derecho en la figura 3.2.7). Observando con cuidado, esta última afirmación es falsa cuando para $x_0=0.5$. Esto debe ser así pues le "damos preferencia" a la rendija localizada en la región [0,1], o primer rendija.

3.2.2. Distribuciones de probabilidad en la posición. A continuación mostramos el comportamiento general de la distribución de probabilidad (total) en la posición. Como antes, pintamos gráficas tridimensionales (como "inciso a") y gráficas de densidad de contornos (como "inciso b") en cada una de las figuras 3.2.9 y 3.2.10 (el haz incide entre las dos rendijas), y 3.2.11 y 3.2.12 (el haz incide en el centro de la primer rendija).

Cabe mencionar que, en general, en las gráficas tridimensionales hemos decidido recortar la densidad de probabilidad (el eje z) en y>0 (el comportamiento en esta región se puede apreciar mejor en las gráficas bidimensionales de densidad de contornos) a cambio de mostrar lo mejor posible el comportamiento en la parte transmitida.

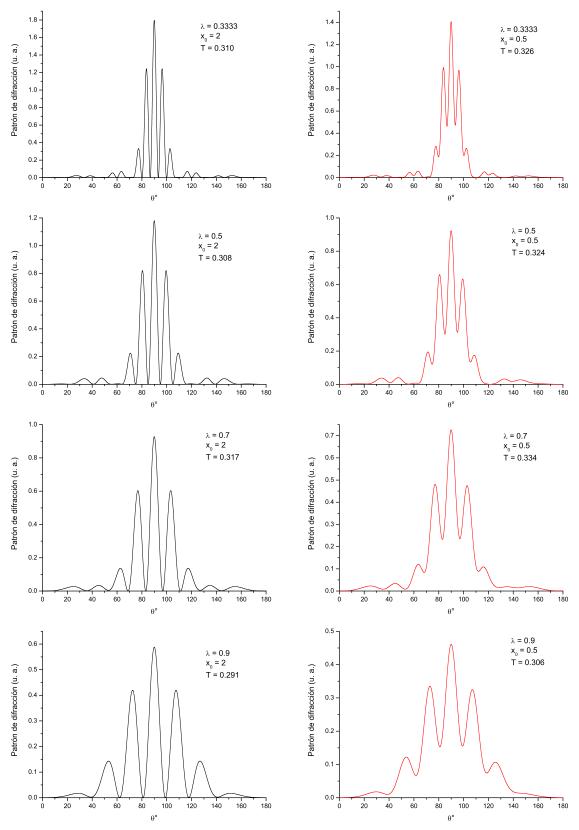


FIGURA 3.2.6. [2 rendijas] Patrones de difracción con diferente longitud de onda λ del paquete incidente calculados con 25 modos en la base. Se ha puesto $a=1,\ x_0=2$ a la izquierda y $x_0=0.5$ a la derecha, $\sigma=5,\ d=2$ y $\alpha=0.\ |T+R-1|<10^{-5}$.

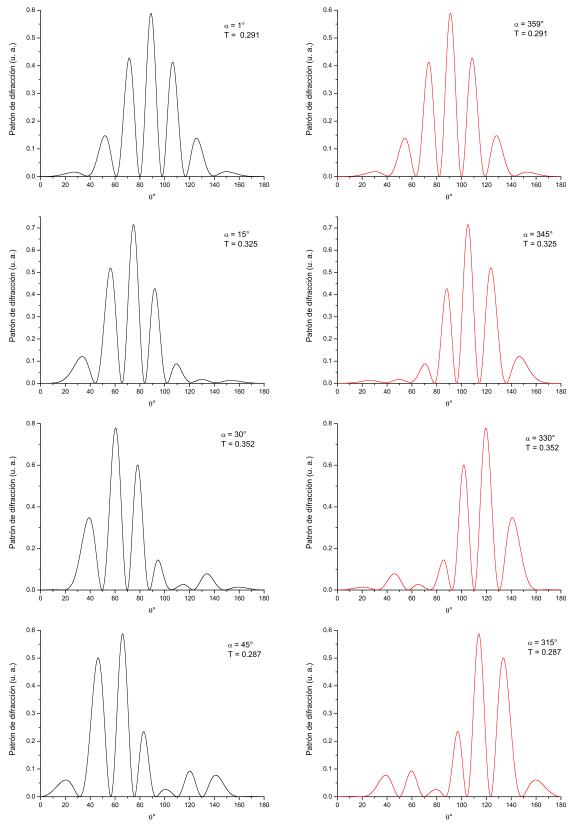


FIGURA 3.2.7. [2 rendijas] Patrones de difracción por un paquete incidiendo con ángulo α calculados con 25 modos en la base. Se ha puesto $a=1,\ x_0=2$, $\sigma=5,\ d=2$ y $\lambda=0.9.\ |T+R-1|<5$ x10⁻⁶.

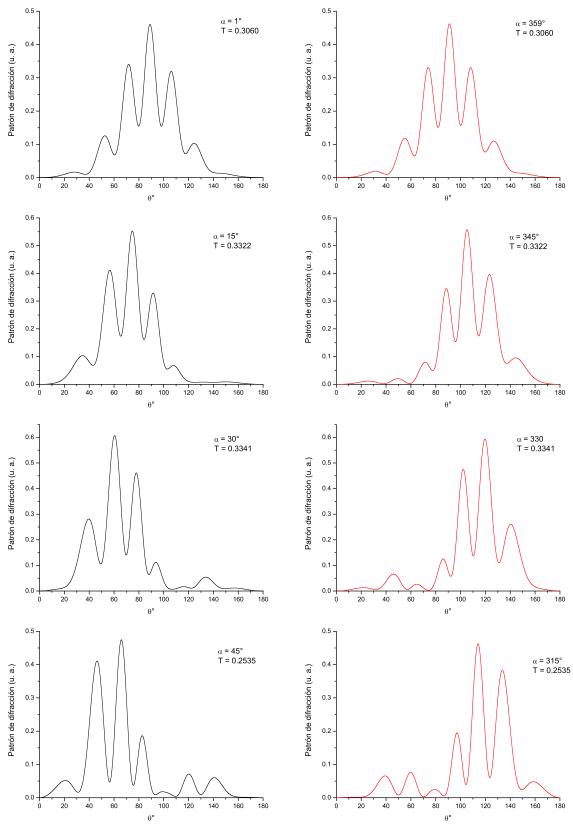


FIGURA 3.2.8. [2 rendijas] Patrones de difracción por un paquete incidiendo con ángulo α calculados con 25 modos en la base. Se ha puesto $a=1,\ x_0=0.5$, $\sigma=5,\ d=2$ y $\lambda=0.9.\ |T+R-1|<6$ x10⁻⁶.

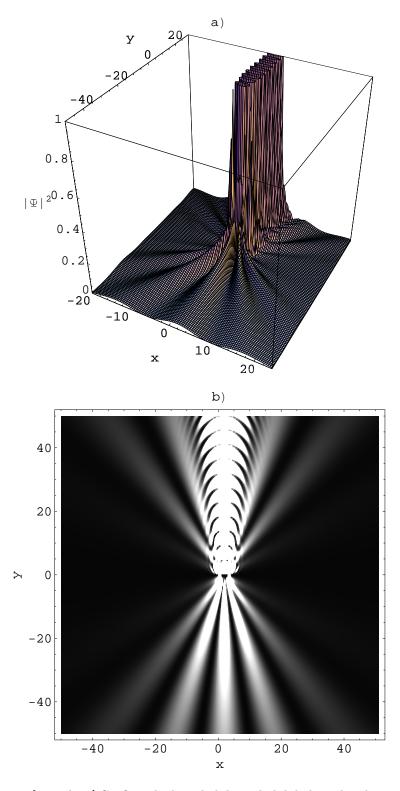


FIGURA 3.2.9. [2 rendijas] Gráficas de densidad de probabilidad total en la región lejana calculadas con 25 modos en la base. Se ha puesto $a=1,\,x_0=2$, $\sigma=5,\,d=2,\,\lambda=0.9$ y $\alpha=0.$

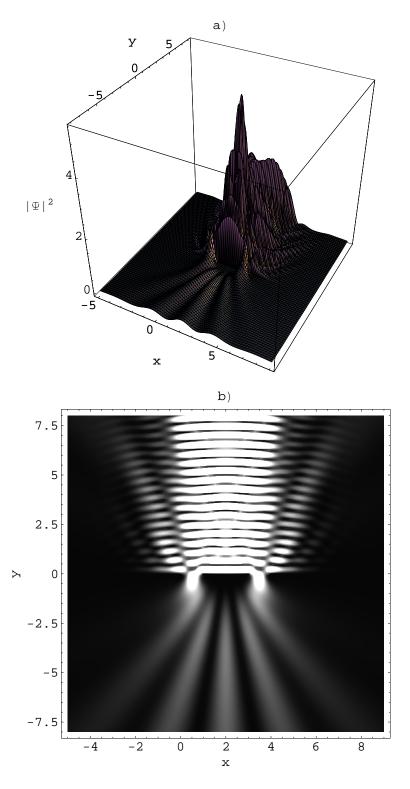


FIGURA 3.2.10. [2 rendijas] Gráficas de densidad de probabilidad total en la región cercana calculadas con 25 modos en la base. Se ha puesto $a=1,\ x_0=2$, $\sigma=5,\ d=2,\ \lambda=0.9$ y $\alpha=0.$

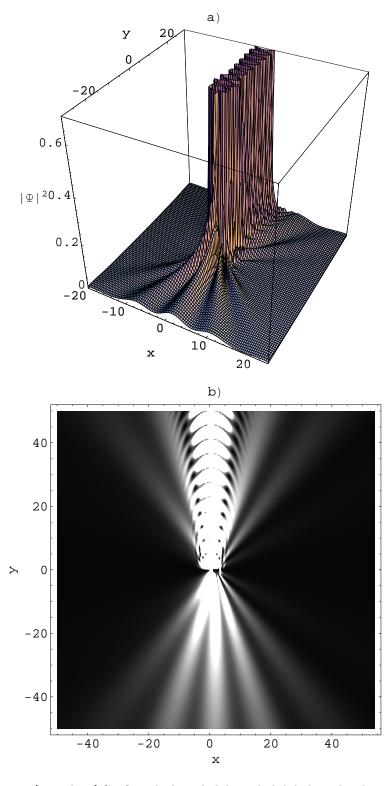


FIGURA 3.2.11. [2 rendijas] Gráficas de densidad de probabilidad total en la región lejana calculadas con 25 modos en la base. Se ha puesto $a=1,\,x_0=0.5$, $\sigma=5,\,d=2,\,\lambda=0.9$ y $\alpha=0.$

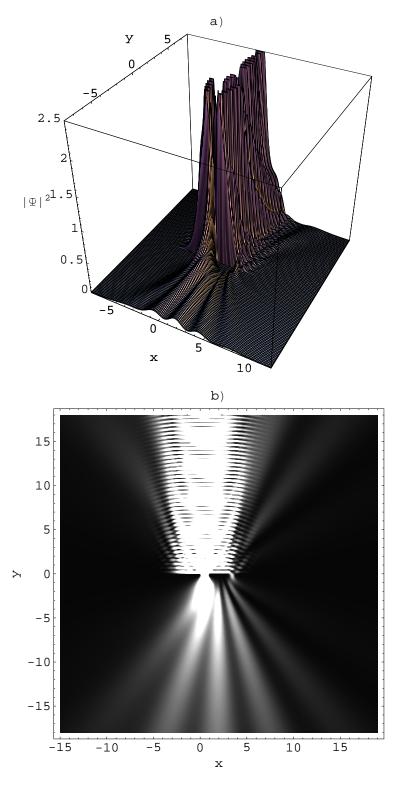


FIGURA 3.2.12. [2 rendijas] Gráficas de densidad de probabilidad total en la región cercana calculadas con 25 modos en la base. Se ha puesto $a=1,\,x_0=0.5$, $\sigma=5,\,d=2,\,\lambda=0.9$ y $\alpha=0.$

CAPíTULO 4

Comparación con el experimento

Dedicaremos este pequeño capítulo a la comparación entre los cálculos utilizando nuestra metodología y los experimentos de difracción de partículas por rendijas. Como veremos más adelante, las longitudes de onda empleadas en estos experimentos son mucho más pequeñas que el tamaño (o ancho) de las rendijas. Nuevos y mejores algoritmos numéricos fueron implementados en la programación sólo para corroborar que la metodología aplicada es satisfactoria en la predicción del experimento. Haremos uso de los resultados de Roland Gähler y Anton Zeilinger [21] quienes utilizan neutrones en sus experimentos. Como ya habíamos explicado en la sección 1.4, a diferencia de los experimentos con electrones (y otras partículas), con neutrones se obtiene una mejor precisión por su neutralidad eléctrica y lo pequeño de su momento magnético.

Para hacer la comparación calcularemos, como en el capítulo anterior, la distribución angular del flujo de probabilidad transmitido en infinito $(y \to -\infty)$ normalizado al flujo de probabilidad incidente. Como podemos observar de la figura 1.4.1 en la página 14, Zeilinger y Gähler han graficado el número de cuentas (en un lapso de tiempo) que llegan a una posición de una pantalla localizada 5 metros delante de las rendijas. Con esta información y la escala que aparece en cada distribución de la figura (100 μ m = 10^{-4} m) podemos convertir micrómetros a grados, en buena aproximación, con la fórmula del arco:

$$s = r\theta$$

$$\Rightarrow 10^{-4} \text{m} \approx 5 \text{m}\theta$$

$$\therefore \quad \theta \approx 0.00002 \text{ rad} \approx 0.0011^{\circ}$$

donde $\theta = 0.0011^{\circ}$ es el equivalente, en este caso, a 100 μ m en la pantalla.

4.1. Una rendija

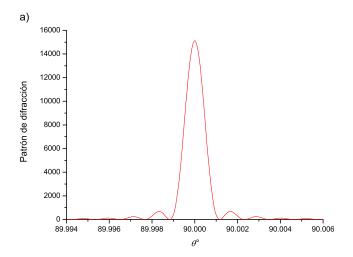
Primero consideremos una rendija de ancho 96.07 μ m. Hemos escogido este valor por ser el óptimo del ajuste (linea continua en la figura 1.4.1 arriba) de los datos experimentales realizado por Zeilinger y Gähler [21] para esta rendija en particular¹. La longitud de onda reportada para este experimento es $\lambda = 19.26$ (promedio) ± 0.70 (ancho de banda) ± 0.02 (error) Å. Escogeremos, para hacer la comparación, $\lambda = \lambda_{prom} = 19.26$ Å. Desde ahora advertimos que nuestro patrón de difracción no debería coincidir exactamente con el del experimento. La razón es que se tiene un "ancho de banda" de 0.70 Å, es decir, se manejan neutrones con longitud de onda De Broglie desde 18.56 Å hasta 19.96 Å. Del estudio de la figura 3.1.4 podríamos esperar que el patrón de difracción esté difuminado, en el sentido que los máximos y los mínimos habrán de bajar y subir un poco, respectivamente. Por ejemplo, si sólo consideramos el patrón por

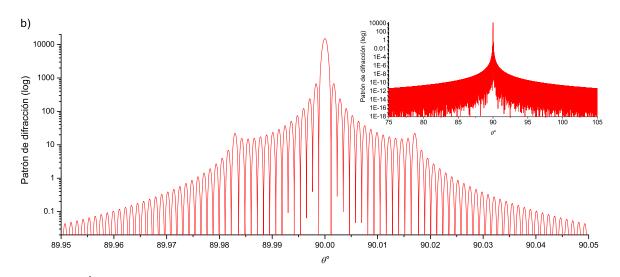
 $^{^1}$ El valor reportado del ancho de esta rendija medido por métodos ópticos y mecánicos es de 92.1 \pm 0.3 μm y 91.5 \pm 0.4 μm , respectivamente. Esta pequeña (pero considerable) discrepancia entre el valor medido y el óptimo para el ajuste es un problema para los autores de [21], por lo que sugieren repetir el experimento. Este problema ya no se encuentra cuando realizan el experimento con una rendija de 22.7 μm (medida óptica y mecánicamente, sin reportar errores), cuyo valor óptimo para el ajuste fue de 23 μm y el cual también discutiremos más adelante.

 λ_{prom} (y el haz incide centrado a la rendija), habrán regiones que hemos denominado minimos, digamos $m_1, m_2, ...$, donde no llegará absolutamente ningún neutrón. Sin embargo, en este experimento también arriban neutrones con $\lambda' = \lambda_{prom} + \Delta \lambda$, con $\Delta \lambda/\lambda_{prom} \ll 1$ y cuyo patrón de difracción tiene mínimos $m'_1, m'_2, ...$, que no coinciden necesariamente con los generados por λ_{prom} . Así, en el patrón de difracción generado por los neutrones con λ_{prom} y λ' (y en general con longitudes de onda entre 18.56 y 19.96 Å) es muy probable que dejen de existir regiones en donde no lleguen neutrones (alrededor del máximo principal) y, por lo tanto, los mínimos de este patrón combinado se verán levantados. Otra posibilidad es que el haz incidente no sean totalmente simétrico con respecto al centro de la rendija (que el paquete no incida justo en el centro de la rendija, vea figura 3.1.3 en la página 45). Nos conformaremos con encontrar que nuestras gráficas calculadas coinciden "en promedio" con el patrón generado por el experimento.

Por convención, en este trabajo cada longitud está medida con respecto al ancho de la rendija, por lo que escogemos $a=1,\ \lambda=0{,}00002,\ x_0=0.5,\ \sigma=5$ y $\alpha=0$ (vea la figura 4.1.1c). Tomando en cuenta la discusión del párrafo anterior vemos que nuestro cálculo concuerda bien con el experimento. Podemos observar también que el patrón está muy localizado alrededor de 90° y aquí radica la dificultad de ser detectado. Aquel que observe sin un microscopio la pantalla se quedará con la impresión de que no existe ninguna interferencia y no hallará el carácter ondulatorio de la materia. En realidad, existe una cantidad impresionante de máximos y mínimos, muy juntos, como se puede notar en la figura 4.1.1b, y que se extienden a los 180° permitidos por el arreglo experimental.

Un ejemplo más (y que demuestra que el anterior no es coincidencia) se obtiene comparando el patrón generado por una rendija de 23 μ m y la misma longitud de onda de De Broglie que antes. Luego, se escoge $a=1, \lambda=0.000085, x_0=0.5, \sigma=5$ y $\alpha=0$ (vea la figura 4.1.2).





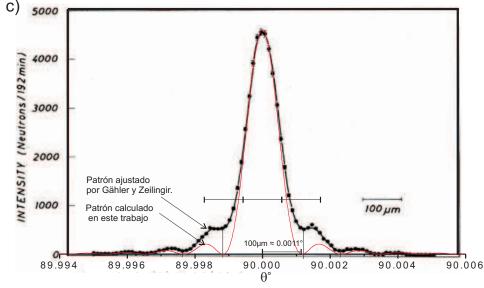


FIGURA 4.1.1. a) Patrón de difracción por una rendija calculado con 30 modos en la base. Se ha puesto $a=1, \lambda=0.00002, x_0=0.5, \sigma=5$ y $\alpha=0.$ T=0.307 y |T+R-1|<4x 10^{-3} . b) Mismo patrón pero se utiliza escala logarítmica en el eje y. c) Comparación con el experimento (de Zeilinger et. al. (1988), Gähler y Zeilinger (1991) [21]).

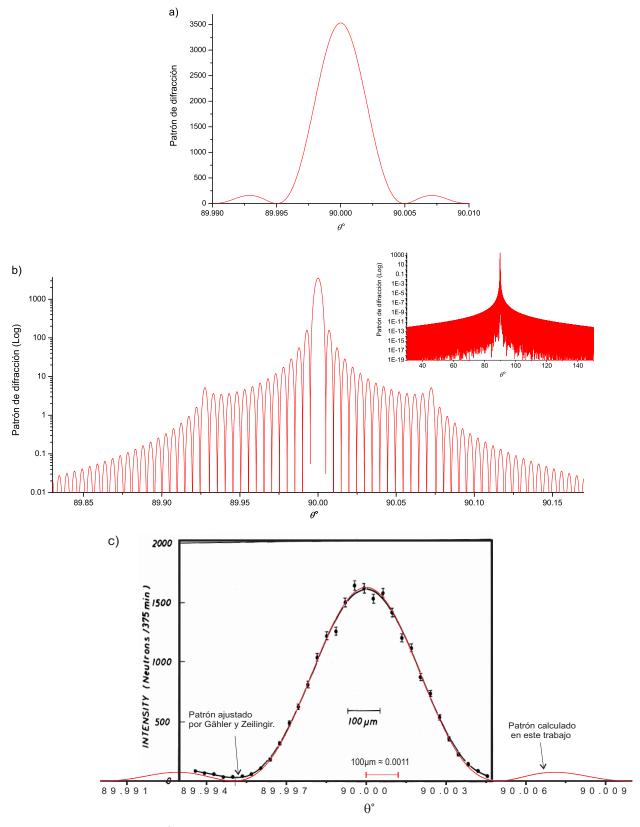


FIGURA 4.1.2. a) Patrón de difracción por una rendija calculado con 30 modos en la base. Se ha puesto $a=1, \lambda=0.000085, x_0=0.5, \sigma=5$ y $\alpha=0.$ T=0.304 y |T+R-1|<2x 10^{-3} . b) Mismo patrón pero se utiliza escala logarítmica en el eje y. c) Comparación con el experimento (de Zeilinger et. al. (1988), Gähler y Zeilinger (1991) [21]).

4.2. Dos rendijas

Finalmente compararemos el patrón generado por dos rendijas. Zeilinger y Gähler [21] reportan un arreglo de dos rendijas con dimensiones de 21.9 (rendija izquierda) - 104.1 (alambre de boro) - 22.5 (rendija derecha) μ m, medidas mediante un método óptico. Las dimensiones que hacen óptimo su ajuste fueron de 21.5 - 104.1 - 22.3 μ m. Para facilitar la programación hemos establecido a lo largo de este trabajo $a_1=a_2=a$ (igual ancho de las rendijas). Aquí calcularemos el patrón de difracción para un arreglo de dos rendijas con las siguientes dimensiones: 21.5 - 104.1 - 21.5 μ m. Por otro lado, la longitud de onda reportada es de $\lambda=18.45$ (promedio) \pm 1.40 (ancho de banda) \pm 0.02 (error) Å. Aquí escogeremos $\lambda_{prom}=18.45$ Å. Además, vamos a considerar el ancho del paquete de ondas incidente igual al de la rendija de entrada (colimadora) cuyo tamaño es de 20 μ m (la cual se encuentra 5 m antes de las rendijas que habrán de crear difracción en el arreglo experimental de Zeilinger y Gähler) y supondremos que el haz incide centrado entre las dos rendijas .

De nuevo, considerando que cada longitud está medida con respecto al ancho de la rendija, tomamos $a=1,\ d=4.84,\ \lambda=0.000086,\ x_0=3.421,\ \sigma=0.93\ y\ \alpha=0$ (vea la figura 4.2.1c). Definitivamente obtenemos de nuevo el comportamiento "promedio" del patrón de difracción. Sin embargo, es importante notar que se ha escogido una región del patrón de difracción que no es precisamente la que está justo alrededor de 90°. En la figura 4.2.1a (mini-figura) se muestra que la intensidad en 90° es mínima (y del cálculo no es exactamente cero como se puede observar más claramente en la figura 4.2.1b). Aquí descubrimos que el máximo de la región obtenida por Zeilinger y Gähler está alrededor de 89.9896° y debe ser éste (y no el de la derecha alrededor de 90.0104°) por la asimetría que presenta el patrón. Cabe mencionar que en [21] (Gähler y Zeilinger (1991)) se asegura que esta asimetría se explica totalmente por la diferencia entre los anchos de las rendijas. Nosotros no hemos introducido diferencia entre las rendijas y, no obstante, hemos encontrado que en realidad mucha de esta asimetría es debida a que la región del patrón de difracción escogida en el experimento no está en el centro del patrón de difracción.

Finalmente, sabemos que el patrón de difracción calculado es correcto por las siguientes razones: primero, por el proceso de convergencia iterativa que hemos realizado a lo largo de este trabajo, aumentando el número de modos en la base (y el número de pasos en las integrales calculadas numéricamente) hasta que el patrón de difracción no cambia y en general tenemos buena conservación de la probabilidad $T + R \approx 1$; y segundo (y sólo en este único caso en el cual hemos llevado al límite la precisión numérica), porque el patrón coincide en promedio bien con el experimento.

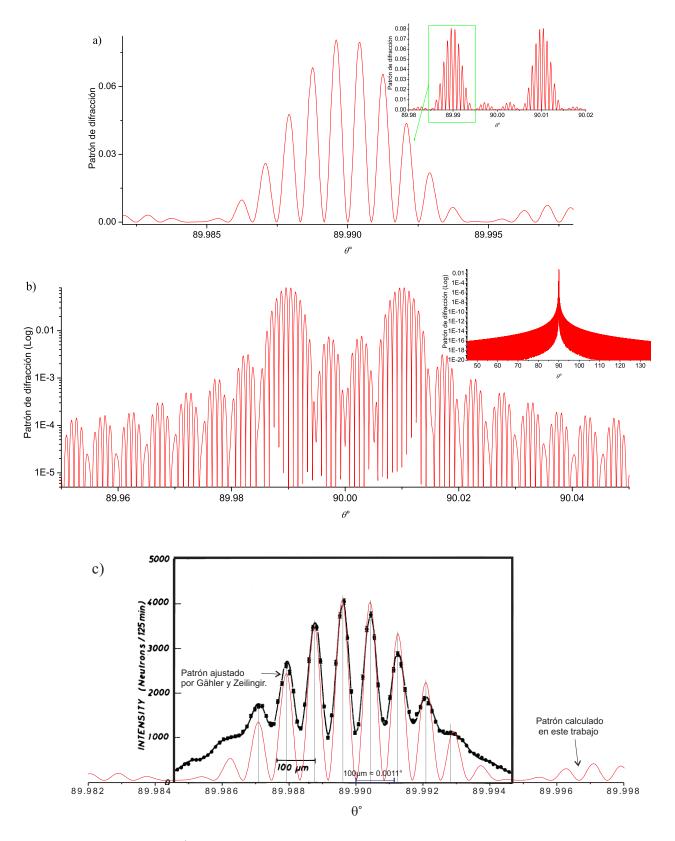


FIGURA 4.2.1. a) Patrón de difracción por dos rendijas calculado con 30 modos en la base. Se ha puesto $a_1=a_2=1,\ d=4.84,\ \lambda=0.000086,\ x_0=3.421,\ \sigma=0.93$ y $\alpha=0$. b) Mismo patrón pero se utiliza escala logarítmica en el eje y. c) Comparación con el experimento (de Zeilinger et. al. (1988), Gähler y Zeilinger (1991) [21]).

Conclusiones

En este trabajo se ha hecho una breve revisión histórica del fenómeno de la difracción. Desde el experimento de Young (1815) de luz pasando por rendijas (que echaba abajo la teoría corpuscular de la luz de Newton), hasta la descripción de Maxwell (1860) de la luz como una onda electromagnética y la teoría de Rayleigh-Sommerfeld (1896) de la difracción de la luz. Hemos visto que hasta este punto no se conocía el carácter ondulatorio de la materia y la luz se identificaba completamente como una onda. En el texto nos hemos extendido un poco más revisando el desarrollo de la teoría cuántica: desde los "cuantos" de energía de Planck (1900), pasando por los descubrimientos muy importantes de Einstein (1905-1925) sobre el carácter corpuscular y estadístico de la luz, hasta la hipótesis de De Broglie (1924) sobre la dualidad entre ondas y partículas. De Broglie (1924) anticipa la difracción electrones y esta hipótesis es comprobada experimentalmente por Davisson, Germer y Thompson (1927) en cristales. No pasaría mucho tiempo para que se verificara que lo mismo ocurría para partículas compuestas, como átomos y moléculas.

Para interpretar a la función de onda introducida por Schrödinger (1925), en este trabajo hemos recurrido a los experimentos de difracción de corpúsculos por rendijas. El famoso experimento pensado de Feynman de la doble rendija [1] fue llevado a cabo, por primera vez, por Jönsson (1961) y demostraba (aunque cualitativamente) que la hipótesis de Born (1926), de que el módulo al cuadrado de la función de onda (en el espacio) describía la probabilidad de que los electrones llegaran a una región del espacio y del tiempo, era correcta. Para descartar que los patrones de difracción son resultado de un fenómeno del tipo cooperativo se han mencionado los experimentos en Bolonia de Donati, Missiroli, Pozzi y Merli (1972-1974) con electrones emitidos uno por uno. Por claridad, se han presentado los resultados de Tonomura y colaboradores en Hitachi (1989), quienes lograron (de manera efectiva) separar alrededor de 120 km a los electrones consecutivos. La demostración cuantitativa de la hipótesis de Born, en la versión de difracción por rendijas, fue llevada a cabo con neutrones por Zeilinger y Gähler (1988). De estos experimentos concluimos que la función de onda describe a un ensemble (y no a una sola partícula) y que las manifestaciones del comportamiento ondulatorio son estadísticos en la naturaleza y siempre surgen como resultados colectivos de muchos eventos.

Al final del capítulo 1 se discute un poco sobre la completez de la teoría cuántica y si en verdad no existe algún mecanismo (variables ocultas) detrás del comportamiento tan azaroso de la naturaleza. Se ha analizado esta posibilidad desde el punto de vista de la mecánica cuántica de Bohm (1952), de la que se obtienen lo que hemos definido como trayectorias cuánticas (posiblemente relacionadas con las que tomarían en promedio las partículas [esta es una linea de invesgación abierta]), y que muestra explícitamente el carácter no-local de la teoría cuántica, un hecho casi indiscutible de los experimentos de Aspect [32]. Se hace mención de las teorías estocásticas como una posibilidad real a la explicación del fenómeno cuántico.

Hemos dedicado todo el capítulo 2 a exponer una metodología para resolver la ecuación de Schrödinger de una partícula (masiva, sin espín y con energía bien definida) que incide sobre una pared impenetrable con una o dos rendijas, de manera exacta sin aproximación física alguna. Esta metodología se basa en

CONCLUSIONES 75

descomponer la solución estacionaria, en todo el espacio de configuración, en ondas planas (transformada de Fourier). La necesidad física de que la función de onda se anule muy lejos de la pared en la región de incidencia, limita la aplicación de esta metodología a longitudes de onda más pequeñas que el ancho del haz incidente. El acoplamiento con las fronteras (la pared) se hace en el espacio de momentos utilizando el teorema de Parseval-Plancherel. El resultado de este procedimiento es que la solución queda en términos de un sistema matricial infinito. Además, las entradas o componentes de las matrices de este sistema son integrales que de ninguna manera son triviales. La generalización a un sistema de n rendijas es casi directa a partir de la solución para dos rendijas en cada región del espacio.

En el capítulo 3 hacemos uso de los resultados del capítulo 2 para describir el comportamiento del patrón de difracción del campo de Schrödinger y de la densidad de probabilidad para varios parámetros ondageométricos que caracterizan al haz incidente y al sistema de rendijas. El sistema infinito de ecuaciones es resuelto numéricamente a través de un proceso de convergencia iterativa; es decir, las matrices son truncadas a unas de cierto tamaño mxm (se resuelve el sistema de ecuaciones y se grafican los resultados), luego a unas de tamaño (m+1)x(m+1) (nuevamente se resuelve el sistema de ecuaciones y se vuelven a graficar los resultados), etcétera, hasta que se obtiene que el patrón de difracción o la densidad de probabilidad en general ya no cambia y hay buena conservación de la probabilidad (coeficiente de transmisión más coeficiente de transmisión es, dentro del intervalo de tolerancia, igual a uno). Todos los resultados numéricos se han obtenido utilizando un software programado en lenguaje FORTRAN. Por otro lado, aunque las soluciones generales incluyen el caso de que la pared tiene grosor y las rendijas son de cualquier tamaño, numéricamente sólo trabajamos el caso en que este grosor es cero y el tamaño de las dos rendijas (en la doble rendija) son iguales. Todas las distancias fueron medidas respecto al ancho de las rendijas. Aquí se manejan longitudes de onda que son muy cercanas al tamaño de la rendija y esta caracterización es la mayor aportación de este trabajo.

Para una y dos rendijas hemos graficado la densidad de probabilidad en el espacio, tanto en la región cercana como en la región lejana, para ciertos parámetros del haz y las rendijas. Utilizamos los patrones de difracción para estudiar la distribución angular de llegada de las partículas a una pantalla muy lejos de la pared en la parte transmitida. En particular se encuentra que si se grafica el coeficiente de transmisión contra la separación entre rendijas, se puede recuperar la longitud de onda de De Broglie del haz incidente.

Finalmente, en el capítulo 4 conseguimos recuperar en promedio los patrones de difracción de neutrones obtenidos por Zeilinger y Gähler en [21] para una y dos rendijas. Esta comparación con el experimento confirma que la metodología utilizada en este trabajo es adecuada para una extensa gama de valores de los parámetros ondageométricos que caracterizan a estos sistemas.

Mediante el uso de la metodología desarrollada en este trabajo de tesis es posible calcular otras cantidades importantes para un estudio más extenso del fenómeno de difracción de partículas por rendijas. Aunque de nuestras gráficas de densidad de contornos hemos obtenido en buena medida cómo fluye la probabilidad, sería conveniente examinar explícitamente la densidad de corriente o flujo de probabilidad en regiones con comportamiento complejo, por ejemplo, cerca de las rendijas. De igual forma, con este método es factible un análisis profundo del potencial de Bohm. De este último se podrían calcular las trayectorias cuánticas que, como comentamos en la introducción, ofrecen una posible extensión de la mecánica cuántica convencional.

APÉNDICE A

Algunos Cálculos explícitos

A.1. Una rendija

Evaluemos $\Phi_n(p_x)$:

$$\Phi_n(p_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar}p_x x} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{p_{x_n} x}{\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}p_x x} dx =
= \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a}} \int_0^a e^{-\frac{i}{\hbar}p_x x} \sin\frac{p_{x_n} x}{\hbar} dx = \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a}} \int_0^a e^{-\frac{i}{\hbar}p_x x} \sin\frac{n\pi x}{a} dx = \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a}} I_n(a).$$

Haciendo la integral por partes,

$$I_{n}(a) = -\frac{a}{n\pi} e^{-\frac{i}{\hbar}p_{x}x} \cos \frac{n\pi x}{a} \Big|_{0}^{a} - \frac{ip_{x}a}{\hbar n\pi} \int_{0}^{a} e^{-\frac{i}{\hbar}p_{x}x} \cos \frac{n\pi x}{a} dx =$$

$$= -\frac{a}{n\pi} \left((-1)^{n} e^{-\frac{i}{\hbar}p_{x}a} - 1 \right) - \frac{ip_{x}a}{\hbar n\pi} \left[\frac{a}{n\pi} e^{-\frac{i}{\hbar}p_{x}x} \sin \frac{n\pi x}{a} dx \Big|_{0}^{a} + \frac{ip_{x}a}{\hbar n\pi} I_{n}(a) \right] =$$

$$= -\frac{a}{n\pi} \left((-1)^{n} e^{-\frac{i}{\hbar}p_{x}a} - 1 \right) - \frac{ip_{x}a}{\hbar n\pi} \left[0 + \frac{ip_{x}a}{\hbar n\pi} I_{n}(a) \right]$$

$$\Rightarrow I_{n}(a) = \frac{-\frac{a}{n\pi} \left((-1)^{n} e^{-\frac{i}{\hbar}p_{x}a} - 1 \right)}{1 + \left(\frac{ip_{x}a}{\hbar n\pi} \right)^{2}} = \frac{-\frac{\hbar}{p_{x}n} \left((-1)^{n} e^{-\frac{i}{\hbar}p_{x}a} - 1 \right)}{1 - \left(\frac{p_{x}}{p_{x_{n}}} \right)^{2}}.$$
(A.1.1)

(A.1.2)
$$\therefore \Phi_n(p_x) = \sqrt{\frac{\hbar}{\pi a}} p_{x_n} \frac{\left[(-1)^n e^{-\frac{i}{\hbar} p_x a} - 1 \right]}{p_x^2 - p_{x_n}^2}.$$

Resolvamos ahora el sistema (2.2.82) y (2.2.83). Multipliquemos a (2.2.82) por $(\Lambda^U)^{-1}$ y a (2.2.83) por $(\Lambda^D)^{-1}$ por la izquierda y restemos las ecuaciones:

$$\begin{cases} \left(\Lambda^{U}\right)^{-1} \left(\Lambda^{U}\overrightarrow{a} + M^{U}\overrightarrow{b}\right) = I_{\infty}\overrightarrow{a} + \left(\Lambda^{U}\right)^{-1} M^{U}\overrightarrow{b} = \left(\Lambda^{U}\right)^{-1} \overrightarrow{\gamma}, \\ \left(\Lambda^{D}\right)^{-1} \left(\Lambda^{D}\overrightarrow{a} + M^{D}\overrightarrow{b}\right) = I_{\infty}\overrightarrow{a} + \left(\Lambda^{D}\right)^{-1} M^{D}\overrightarrow{b} = \left(\Lambda^{D}\right)^{-1} \overrightarrow{0} = \overrightarrow{0}, \end{cases}$$

$$\Rightarrow \left(\Lambda^{U}\right)^{-1} M^{U}\overrightarrow{b} - \left(\Lambda^{D}\right)^{-1} M^{D}\overrightarrow{b} = \left(\Lambda^{U}\right)^{-1} \overrightarrow{\gamma}$$

$$\Rightarrow \left[\left(\Lambda^{U}\right)^{-1} M^{U} - \left(\Lambda^{D}\right)^{-1} M^{D}\right] \overrightarrow{b} = \left(\Lambda^{U}\right)^{-1} \overrightarrow{\gamma}$$

$$\Rightarrow \overrightarrow{b} = \left[\left(\Lambda^{U}\right)^{-1} M^{U} - \left(\Lambda^{D}\right)^{-1} M^{D}\right]^{-1} \left[\left(\Lambda^{U}\right)^{-1} \overrightarrow{\gamma}\right] = \left\{\left[\left(\Lambda^{U}\right)^{-1} M^{U} - \left(\Lambda^{D}\right)^{-1} M^{D}\right]^{-1} \left(\Lambda^{U}\right)^{-1}\right\} \overrightarrow{\gamma} = \left[\left(\Lambda^{U}\right) \left[\left(\Lambda^{U}\right)^{-1} M^{U} - \left(\Lambda^{D}\right)^{-1} M^{D}\right]^{-1} \overrightarrow{\gamma} = \left[\left(\Lambda^{U}\right) \left(\Lambda^{U}\right)^{-1} M^{U} - \left(\Lambda^{U}\right) \left(\Lambda^{D}\right)^{-1} M^{D}\right]^{-1} \overrightarrow{\gamma} = \left[\left(\Lambda^{U}\right) \left(\Lambda^{U}\right)^{-1} M^{U} - \left(\Lambda^{U}\right) \left(\Lambda^{D}\right)^{-1} M^{D}\right]^{-1} \overrightarrow{\gamma}.$$

$$(A.1.3) \qquad \qquad \therefore \quad \overrightarrow{b} = \left[M^U - \left(\Lambda^U \right) \left(\Lambda^D \right)^{-1} M^D \right]^{-1} \overrightarrow{\gamma}.$$

Si substituimos en (2.2.83):

$$\Lambda^{D}\overrightarrow{a} + M^{D} \left\{ \left[M^{U} - (\Lambda^{U}) (\Lambda^{D})^{-1} M^{D} \right]^{-1} \overrightarrow{\gamma} \right\} = \overrightarrow{0}$$

$$\Rightarrow \Lambda^{D}\overrightarrow{a} + \left\{ M^{D} \left[M^{U} - (\Lambda^{U}) (\Lambda^{D})^{-1} M^{D} \right]^{-1} \right\} \overrightarrow{\gamma} = \overrightarrow{0}$$

$$\Rightarrow \Lambda^{D}\overrightarrow{a} + \left\{ \left[M^{U} - (\Lambda^{U}) (\Lambda^{D})^{-1} M^{D} \right] (M^{D})^{-1} \right\}^{-1} \overrightarrow{\gamma} = \overrightarrow{0}$$

$$\Rightarrow \Lambda^{D}\overrightarrow{a} + \left\{ M^{U} (M^{D})^{-1} - (\Lambda^{U}) (\Lambda^{D})^{-1} M^{D} (M^{D})^{-1} \right\}^{-1} \overrightarrow{\gamma} = \overrightarrow{0}$$

$$\Rightarrow \Lambda^{D}\overrightarrow{a} + \left\{ M^{U} (M^{D})^{-1} - (\Lambda^{U}) (\Lambda^{D})^{-1} I_{\infty} \right\}^{-1} \overrightarrow{\gamma} = \overrightarrow{0}$$

$$\Rightarrow \Lambda^{D}\overrightarrow{a} = -\left\{ M^{U} (M^{D})^{-1} - (\Lambda^{U}) (\Lambda^{D})^{-1} \right\}^{-1} \overrightarrow{\gamma}$$

$$\Rightarrow \overrightarrow{a} = (\Lambda^{D})^{-1} \left[-\left\{ M^{U} (M^{D})^{-1} - (\Lambda^{U}) (\Lambda^{D})^{-1} \right\}^{-1} \overrightarrow{\gamma} \right] =$$

$$= -\left[\left(\Lambda^{D} \right)^{-1} \left\{ M^{U} (M^{D})^{-1} - (\Lambda^{U}) (\Lambda^{D})^{-1} \right\}^{-1} \overrightarrow{\gamma} =$$

$$= -\left[\left\{ M^{U} (M^{D})^{-1} - (\Lambda^{U}) (\Lambda^{D})^{-1} \right\} (\Lambda^{D}) \right]^{-1} \overrightarrow{\gamma} =$$

$$= -\left[M^{U} (M^{D})^{-1} (\Lambda^{D}) - (\Lambda^{U}) (\Lambda^{D})^{-1} (\Lambda^{D}) \right]^{-1} \overrightarrow{\gamma} =$$

$$= -\left[M^{U} (M^{D})^{-1} (\Lambda^{D}) - (\Lambda^{U}) I_{\infty} \right]^{-1} \overrightarrow{\gamma}.$$
(A.1.4)
$$\therefore \overrightarrow{a} = -\left[M^{U} (M^{D})^{-1} (\Lambda^{D}) - (\Lambda^{U}) \right]^{-1} \overrightarrow{\gamma}.$$

Una integral difícil es la siguiente:

$$\begin{split} (\Phi_m(p_x), p_y \Phi_n(p_x)) &= \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_m(p_x)^{\star} p_y \Phi_n(p_x) \mathrm{d}p_x = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\sqrt{\frac{\hbar}{\pi a}} p_{x_m} \frac{\left[(-1)^m e^{-\frac{i}{\hbar} p_x a} - 1 \right]}{p_x^2 - p_{x_m}^2} \right]^{\star} p_y \sqrt{\frac{\hbar}{\pi a}} p_{x_n} \frac{\left[(-1)^n e^{-\frac{i}{\hbar} p_x a} - 1 \right]}{p_x^2 - p_{x_n}^2} \mathrm{d}p_x = \\ &= \frac{\hbar}{\pi a} p_{x_m}^{\star} p_{x_n} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\left[(-1)^m e^{\frac{i}{\hbar} p_x a} - 1 \right]}{p_x^2 - p_{x_m}^2} \sqrt{p^2 - p_x^2} \frac{\left[(-1)^n e^{-\frac{i}{\hbar} p_x a} - 1 \right]}{p_x^2 - p_{x_n}^2} \mathrm{d}p_x = \\ &= \frac{\hbar}{\pi a} p_{x_m} p_{x_n} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{p^2 - p_x^2} \frac{(-1)^{m+n} + 1 + (-1)^{m+1} e^{\frac{i}{\hbar} p_x a} + (-1)^{n+1} e^{-\frac{i}{\hbar} p_x a}}{(p_x^2 - p_{x_m}^2)} \mathrm{d}p_x. \end{split}$$

Note que solo tenemos 4 posibilidades sobre los n y m.

1. Que n y m sean pares. Entonces,

$$(-1)^{m+n} + 1 = 2 \quad \text{y} \quad (-1)^{m+1} e^{\frac{i}{\hbar}p_x a} + (-1)^{n+1} e^{-\frac{i}{\hbar}p_x a} = -2\cos\frac{p_x a}{\hbar}.$$

$$(A.1.5) \quad \therefore \quad (\Phi_m(p_x), p_y \Phi_n(p_x)) = (\Phi_n(p_x), p_y \Phi_m(p_x)) = \frac{4\hbar}{\pi a} p_{x_m} p_{x_n} \int_0^\infty \frac{\sqrt{p^2 - p_x^2} \left(1 - \cos\frac{p_x a}{\hbar}\right)}{\left(p_x^2 - p_{x_m}^2\right) \left(p_x^2 - p_{x_n}^2\right)} dp_x,$$

donde hemos utilizado también la simetría par del integrando (es claro que el resultado es el mismo al intercambiar m por n y n por m). Demostraremos que el integrando tiene singularidades removibles en $p_x=\pm p_{x_n}=\pm \frac{n\pi\hbar}{a}$ ó $p_x=\pm p_{x_m}=\pm \frac{m\pi\hbar}{a}$. Con estos valores de p_x tenemos que $1-\cos\frac{p_x a}{\hbar}=1-\cos n\pi=1-1=0$. Luego tenemos un $\frac{0}{0}$. Con la regla de L'hôpital es suficiente para demostrar que cuando $p_x\to\pm\frac{n\pi\hbar}{a}$ y $m\neq n$ este cociente no diverge:

$$\lim_{p_x \to \pm \frac{n\pi\hbar}{a}} \frac{\sqrt{p^2 - p_x^2} \left(1 - \cos\frac{p_x a}{\hbar}\right)}{\left(p_x^2 - p_{x_m}^2\right) \left(p_x^2 - p_{x_n}^2\right)} = \lim_{p_x \to \pm \frac{n\pi\hbar}{a}} \left(\sqrt{p^2 - p_x^2}\right) \times \lim_{p_x \to \pm \frac{n\pi\hbar}{a}} \left[\frac{\left(1 - \cos\frac{p_x a}{\hbar}\right)}{\left(p_x^2 - p_{x_m}^2\right) \left(p_x^2 - p_{x_n}^2\right)}\right] = \\
= \sqrt{p^2 - \left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2} \times \lim_{p_x \to \pm \frac{n\pi\hbar}{a}} \left[\frac{\frac{a}{\hbar}\sin\frac{p_x a}{\hbar}}{2p_x \left(p_x^2 - p_{x_m}^2\right) + 2p_x \left(p_x^2 - p_{x_n}^2\right)}\right] = \\
= \sqrt{p^2 - \left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2} \times \frac{0}{\pm 2\frac{n\pi^3\hbar^3}{a^3} \left(n^2 - m^2\right)} = 0.$$

Veamos que sucede en el caso de ser n=m y $p_x\to\pm\frac{n\pi\hbar}{a}$. El procedimiento es el mismo que antes, pero llegaremos rápidamente a un nuevo $\frac{0}{0}$. No obstante, podemos utilizar de nuevo la regla de L'hôpital:

$$\begin{split} \lim_{p_x \to \pm \frac{n\pi\hbar}{a}} \frac{\sqrt{p^2 - p_x^2} \left(1 - \cos\frac{p_x a}{\hbar}\right)}{\left(p_x^2 - p_{x_n}^2\right)^2} &= \sqrt{p^2 - \left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2} \times \lim_{p_x \to \pm \frac{n\pi\hbar}{a}} \frac{\frac{a}{\hbar} \sin\frac{p_x a}{\hbar}}{4p_x \left(p_x^2 - p_{x_n}^2\right)} \\ &= \sqrt{p^2 - \left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2} \times \lim_{p_x \to \pm \frac{n\pi\hbar}{a}} \frac{\left(\frac{a}{\hbar}\right)^2 \cos\frac{p_x a}{\hbar}}{4\left(p_x^2 - p_{x_n}^2\right) + 8p_x^2} \\ &= \sqrt{p^2 - \left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2} \times \frac{\left(\frac{a}{\hbar}\right)^2}{8\left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2} = \frac{a^4 \sqrt{p^2 - \left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2}}{8n^2\pi^2\hbar^4}. \end{split}$$

Esta última cantidad es finita.

2. Que n y m sean impares.

$$(-1)^{m+n} + 1 = 2 \quad \text{y} \quad (-1)^{m+1} e^{\frac{i}{\hbar}p_x a} + (-1)^{n+1} e^{-\frac{i}{\hbar}p_x a} = 2\cos\frac{p_x a}{\hbar}.$$

$$(A.1.6) \quad \therefore \quad (\Phi_m(p_x), p_y \Phi_n(p_x)) = (\Phi_n(p_x), p_y \Phi_m(p_x)) = \frac{4\hbar}{\pi a} p_{x_m} p_{x_n} \int_0^\infty \frac{\sqrt{p^2 - p_x^2} \left(1 + \cos\frac{p_x a}{\hbar}\right)}{\left(p_x^2 - p_x^2\right) \left(p_x^2 - p_x^2\right)} dp_x.$$

Con un procedimiento totalmente análogo al del punto anterior podemos mostrar que el integrando en (A.1.6) tiene singularidades removibles.

3. Que n sea par y m impar.

$$(-1)^{m+n} + 1 = 0 \quad \text{y} \quad (-1)^{m+1} e^{\frac{i}{\hbar}p_x a} + (-1)^{n+1} e^{-\frac{i}{\hbar}p_x a} = 2i \sin \frac{p_x a}{\hbar}$$

$$\Rightarrow (\Phi_m(p_x), p_y \Phi_n(p_x)) = \frac{2i\hbar}{\pi a} p_{x_m} p_{x_n} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sqrt{p^2 - p_x^2} \sin \frac{p_x a}{\hbar}}{(p_x^2 - p_{x_m}^2) (p_x^2 - p_{x_n}^2)} dp_x.$$

$$(A.1.7) \qquad \qquad \therefore \quad (\Phi_m(p_x), p_y \Phi_n(p_x)) = 0.$$

en donde este último resultado se debe a la perfecta antisimetría del integrando en cuestión.

4. Que n sea impar y m par.

$$(-1)^{m+n} + 1 = 0$$
 y $(-1)^{m+1} e^{\frac{i}{\hbar}p_x a} + (-1)^{n+1} e^{-\frac{i}{\hbar}p_x a} = -2i\sin\frac{p_x a}{\hbar}$

$$\Rightarrow (\Phi_m(p_x), p_y \Phi_n(p_x)) = -\frac{2i\hbar}{\pi a} p_{x_m} p_{x_n} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sqrt{p^2 - p_x^2} \sin \frac{p_x a}{\hbar}}{\left(p_x^2 - p_{x_m}^2\right) \left(p_x^2 - p_{x_n}^2\right)} dp_x.$$
(A.1.8)
$$\therefore \quad (\Phi_m(p_x), p_y \Phi_n(p_x)) = 0.$$

Queda por calcular γ_m que involucra explícitamente la función $A(p_x)$. Consideremos el caso particular en el cual la onda $\psi_i(x, \frac{b}{2})$ que incide sobre la pantalla es una función gaussiana de x (esta forma resulta ser de gran interés práctico):

(A.1.9)
$$\psi_i(x, \frac{b}{2}) = \exp\left[-\frac{4(x - x_0)^2}{\sigma^2}\right].$$

Note que

$$\psi_i(x, \frac{b}{2}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} A(p_x) e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - p_y \frac{b}{2})} \mathrm{d}p_x,$$

y entonces $A(p_x)e^{-\frac{i}{\hbar}p_y\frac{b}{2}}$ es la transformada de Fourier de $\psi_i(x,\frac{b}{2})$,

$$\begin{split} A(p_x)e^{-\frac{i}{\hbar}p_y\frac{b}{2}} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_i(x,\frac{b}{2})e^{-\frac{i}{\hbar}p_xx}\mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{4(x-x_0)^2}{\sigma^2}}e^{-\frac{i}{\hbar}p_xx}\mathrm{d}x = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{4z^2}{\sigma^2}}e^{-\frac{i}{\hbar}p_x(z+x_0)}\mathrm{d}z = \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}p_xx_0}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{4z^2}{\sigma^2}-\frac{i}{\hbar}p_xz}\mathrm{d}z = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}p_xx_0}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\left[\left(\frac{2z}{\sigma}+\frac{\sigma}{4}\frac{i}{\hbar}p_x\right)^2-\left(\frac{\sigma}{4}\frac{i}{\hbar}p_x\right)^2\right]}\mathrm{d}z = \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}p_xx_0}e^{\left(\frac{\sigma}{4}\frac{i}{\hbar}p_x\right)^2}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-z'^2}\frac{\sigma}{2}\mathrm{d}z' = \\ &= \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}p_xx_0}e^{\left(\frac{\sigma}{4}\frac{i}{\hbar}p_x\right)^2}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{\sigma}{2}\sqrt{\pi}, \end{split}$$

donde hemos hecho $z=x-x_0$, $z'=\frac{2z}{\sigma}+\frac{\sigma}{4}\frac{i}{\hbar}p_x$ y utilizado el resultado muy conocido $I_0=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-v^2}\mathrm{d}v=\sqrt{\pi}$.

(A.1.10)
$$\therefore A(p_x) = \frac{\sigma}{2\sqrt{2\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}p_x x_0} e^{-\frac{\sigma^2 p_x^2}{16\hbar^2}} e^{\frac{i}{\hbar}p_y \frac{b}{2}}.$$

Luego.

$$\begin{split} \frac{\gamma_m}{2} &= \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_m(p_x)^* p_y A(p_x) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p_y b}{2}} \mathrm{d}p_x = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\sqrt{\frac{\hbar}{\pi a}} p_{x_m} \frac{\left[(-1)^m e^{-\frac{i}{\hbar} p_x a} - 1 \right]}{p_x^2 - p_{x_m}^2} \right]^* p_y A(p_x) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p_y b}{2}} \mathrm{d}p_x = \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{\pi a}} p_{x_m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\left((-1)^m e^{\frac{i}{\hbar} p_x a} - 1 \right) p_y \left(\frac{\sigma}{2\sqrt{2\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} p_x x_0} e^{-\frac{\sigma^2 p_x^2}{16\hbar^2}} \right)}{p_x^2 - p_{x_m}^2} \mathrm{d}p_x. \end{split}$$

(A.1.11)
$$\therefore \quad \gamma_m = \sqrt{\frac{\sigma^2}{2\pi a}} p_{x_m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\left((-1)^m e^{\frac{i}{\hbar} p_x a} - 1 \right) \sqrt{p^2 - p_x^2} e^{-\frac{\sigma^2 p_x^2}{16\hbar^2}} e^{-\frac{i}{\hbar} p_x x_0}}{p_x^2 - p_{x_m}^2} \mathrm{d}p_x.$$

A.2. Dos rendijas

Evaluemos $\Phi_m^{(l)}(p_x)$:

$$\begin{split} \Phi_m^{(1)}(p_x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m^{(1)}(x) e^{-\frac{i}{\hbar}p_x x} \mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^{a_1} \sqrt{\frac{2}{a_1}} \sin\frac{q_{m,1}}{\hbar} x e^{-\frac{i}{\hbar}p_x x} \mathrm{d}x = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a_1}} \int_0^{a_1} e^{-\frac{i}{\hbar}p_x x} \sin\frac{q_{m,1} x}{\hbar} \mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a_1}} \int_0^{a_1} e^{-\frac{i}{\hbar}p_x x} \sin\frac{m\pi x}{a_1} \mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a_1}} I_m(a_1). \end{split}$$

Ya hemos evaluado en la sección anterior el valor de $I_n(a)$ (vea la ecuación (A.1.1)). Luego,

(A.2.1)
$$\Phi_m^{(1)}(p_x) = \sqrt{\frac{\hbar}{\pi a_1}} q_{m,1} \frac{\left[(-1)^m e^{-\frac{i}{\hbar} p_x a_1} - 1 \right]}{p_x^2 - q_{m,1}^2}.$$

También,

$$\begin{split} \Phi_m^{(2)}(p_x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m^{(2)}(x) e^{-\frac{i}{\hbar}p_x x} \mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{a_1+d}^{a_1+a_2+d} \sqrt{\frac{2}{a_2}} \sin\frac{q_{n,2}}{\hbar} [x - (a_1+d)] e^{-\frac{i}{\hbar}p_x x} \mathrm{d}x = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a_2}} \int_{0}^{a_2} e^{-\frac{i}{\hbar}p_x (z + a_1 + d)} \sin\frac{q_{m,2} z}{\hbar} \mathrm{d}z = \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}p_x (a_1 + d)}}{\sqrt{\pi\hbar a_2}} I_m(a_2), \end{split}$$

donde hemos hecho el cambio de variable $z = x - (a_1 + d)$.

(A.2.2)
$$\therefore \Phi_m^{(2)}(p_x) = \sqrt{\frac{\hbar}{\pi a_2}} q_{m,2} e^{-\frac{i}{\hbar} p_x(a_1 + d)} \frac{\left[(-1)^m e^{-\frac{i}{\hbar} p_x a_2} - 1 \right]}{p_x^2 - q_{m,2}^2}.$$

Observe que (A.2.1) y (A.2.2) se pueden escribir sencillamente como

(A.2.3)
$$\Phi_m^{(l)}(p_x) = \sqrt{\frac{\hbar}{\pi a_l}} q_{m,l} e^{-\frac{i}{\hbar} p_x L_l} \frac{\left[(-1)^m e^{-\frac{i}{\hbar} p_x a_l} - 1 \right]}{p_x^2 - q_{m,l}^2},$$

donde L_l es la localización de la l-ésima rendija en el eje x. Es decir, $L_1 = 0$ y $L_2 = a_1 + d$.

En el problema de dos rendijas se han obtenido integrales que se han interpretado como la interferencia que existe entre ellas,

$$\left(\Phi_m^{(l)}(p_x), p_y \Phi_n^{(k)}(p_x)\right) \qquad l \neq k,$$

(además de las que ya habíamos obtenido en el caso de una rendija para cuando l = k). Vamos a escribir explícitamente estas integrales:

$$\begin{split} \left(\Phi_{m}^{(1)}(p_{x}),p_{y}\Phi_{n}^{(2)}(p_{x})\right) &= \int_{-\infty}^{\infty}\Phi_{m}^{(1)}(p_{x})^{\star}p_{y}\Phi_{n}^{(2)}(p_{x})\mathrm{d}p_{x} = \int_{-\infty}^{\infty}\left\{\left[\sqrt{\frac{\hbar}{\pi a_{1}}}q_{m,1}\frac{(-1)^{m}e^{-\frac{i}{\hbar}p_{x}a_{1}}-1}{p_{x}^{2}-q_{m,1}^{2}}\right]^{\star}p_{y}\times \right. \\ &\times \sqrt{\frac{\hbar}{\pi a_{2}}}q_{n,2}e^{-\frac{i}{\hbar}p_{x}(a_{1}+d)}\frac{(-1)^{n}e^{-\frac{i}{\hbar}p_{x}a_{2}}-1}{p_{x}^{2}-q_{n,2}^{2}}\right\}\mathrm{d}p_{x} = \frac{\hbar q_{m,1}q_{n,2}}{\pi\sqrt{a_{1}a_{2}}}\times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty}\frac{(-1)^{m}e^{\frac{i}{\hbar}p_{x}a_{1}}-1}{p_{x}^{2}-q_{m,1}^{2}}p_{y}e^{-\frac{i}{\hbar}p_{x}(a_{1}+d)}\frac{(-1)^{n}e^{-\frac{i}{\hbar}p_{x}a_{2}}-1}{p_{x}^{2}-q_{n,2}^{2}}\mathrm{d}p_{x} = \frac{\hbar q_{m,1}q_{n,2}}{\pi\sqrt{a_{1}a_{2}}}\times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{(-1)^{m+n}e^{-\frac{i}{\hbar}p_{x}a_{2}}+(-1)^{m+1}+(-1)^{n+1}e^{-\frac{i}{\hbar}p_{x}(a_{1}+a_{2})}+e^{-\frac{i}{\hbar}p_{x}a_{1}}}{(p_{x}^{2}-q_{m,1}^{2})\left(p_{x}^{2}-q_{n,2}^{2}\right)}\times \\ &\times e^{-\frac{i}{\hbar}p_{x}d}\sqrt{p^{2}-p_{x}^{2}}\right]\mathrm{d}p_{x}. \end{split}$$

$$(A.2.4) \qquad \qquad \therefore \left(\Phi_m^{(1)}(p_x), p_y \Phi_n^{(2)}(p_x)\right) = \\ = \frac{\hbar q_{m,1} q_{n,2}}{\pi \sqrt{a_1 a_2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^{m+n} e^{-\frac{i}{\hbar} p_x a_2} + (-1)^{m+1} + (-1)^{n+1} e^{-\frac{i}{\hbar} p_x (a_1 + a_2)} + e^{-\frac{i}{\hbar} p_x a_1}}{(p_x^2 - q_{n,1}^2)(p_x^2 - q_{n,2}^2)} p_y e^{-\frac{i}{\hbar} p_x d} dp_x$$

$$\begin{split} \left(\Phi_{n}^{(2)}(p_{x}),p_{y}\Phi_{m}^{(1)}(p_{x})\right) &= \int_{-\infty}^{\infty}\Phi_{n}^{(2)}(p_{x})^{\star}p_{y}\Phi_{m}^{(1)}(p_{x})\mathrm{d}p_{x} = \int_{-\infty}^{\infty}\left\{\left[\sqrt{\frac{\hbar}{\pi a_{2}}}q_{n,2}\frac{(-1)^{n}e^{-\frac{i}{\hbar}p_{x}a_{2}}-1}{p_{x}^{2}-q_{n,2}^{2}}\right.\right. \\ &\times e^{-\frac{i}{\hbar}p_{x}(a_{1}+d)}\right]^{\star}p_{y}\sqrt{\frac{\hbar}{\pi a_{1}}}q_{m,1}\frac{(-1)^{m}e^{-\frac{i}{\hbar}p_{x}a_{1}}-1}{p_{x}^{2}-q_{m,1}^{2}}\right\}\mathrm{d}p_{x} = \frac{\hbar q_{m,1}q_{n,2}}{\pi\sqrt{a_{1}a_{2}}}\times\\ &\times \int_{-\infty}^{\infty}e^{\frac{i}{\hbar}p_{x}(a_{1}+d)}\frac{(-1)^{n}e^{\frac{i}{\hbar}p_{x}a_{2}}-1}{p_{x}^{2}-q_{n,2}^{2}}p_{y}\frac{(-1)^{m}e^{-\frac{i}{\hbar}p_{x}a_{1}}-1}{p_{x}^{2}-q_{m,1}^{2}}\mathrm{d}p_{x} = \frac{\hbar q_{m,1}q_{n,2}}{\pi\sqrt{a_{1}a_{2}}}\times\\ &\times \int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{(-1)^{n+m}e^{\frac{i}{\hbar}p_{x}a_{2}}+(-1)^{m+1}+(-1)^{n+1}e^{\frac{i}{\hbar}p_{x}(a_{1}+a_{2})}+e^{\frac{i}{\hbar}p_{x}a_{1}}}{(p_{x}^{2}-q_{m,1}^{2})}\right]\mathrm{d}p_{x}. \end{split}$$

$$(A.2.5) \qquad \qquad \therefore \left(\Phi_n^{(2)}(p_x), p_y \Phi_m^{(1)}(p_x)\right) = \\ = \frac{\hbar q_{m,1} q_{n,2}}{\pi \sqrt{a_1 a_2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^{n+m} e^{\frac{i}{\hbar} p_x a_2} + (-1)^{m+1} + (-1)^{n+1} e^{\frac{i}{\hbar} p_x (a_1 + a_2)} + e^{\frac{i}{\hbar} p_x a_1}}{(p_x^2 - q_{m,1}^2)(p_x^2 - q_{n,2}^2)} p_y e^{\frac{i}{\hbar} p_x d} dp_x.$$

Hay una simplificación importante que se debe notar. Haciendo $p_x \to -p_x$ en la integral (A.2.5) se obtiene inmediatamente (A.2.4):

(A.2.6)
$$\left(\Phi_n^{(2)}(p_x), p_y \Phi_m^{(1)}(p_x)\right) = \left(\Phi_m^{(1)}(p_x), p_y \Phi_n^{(2)}(p_x)\right).$$

Basta entonces (saber) calcular las integrales (A.2.4) para obtener las integrales (A.2.5). En general, para dos rendijas:

(A.2.7)
$$\left(\Phi_m^{(l)}(p_x), p_y \Phi_n^{(k)}(p_x)\right) = \left(\Phi_n^{(k)}(p_x), p_y \Phi_m^{(l)}(p_x)\right).$$

Por último dejaremos en una forma más atractiva (A.2.4). Para ello consideraremos algunos casos. Antes note que sólo la parte simétrica del integrando contribuye a la integral:

$$(A.2.8) \qquad \left(\Phi_m^{(1)}(p_x), p_y \Phi_n^{(2)}(p_x)\right) =$$

$$= \frac{\hbar q_{m,1} q_{n,2}}{\pi \sqrt{a_1 a_2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^{m+n} \cos \frac{p_x}{\hbar} (a_2+d) + (-1)^{m+1} \cos \frac{p_x}{\hbar} d + (-1)^{n+1} \cos \frac{p_x}{\hbar} (a_1+a_2+d) + \cos \frac{p_x}{\hbar} (a_1+d)}{(p_x^2 - q_{n,1}^2)(p_x^2 - q_{n,2}^2)} p_y dp_x.$$

1. m y n pares.

$$u := (-1)^{m+n} \cos \frac{p_x}{\hbar} (a_2 + d) + \cos \frac{p_x}{\hbar} (a_1 + d) = \cos \frac{p_x}{\hbar} (a_2 + d) + \cos \frac{p_x}{\hbar} (a_1 + d) =$$

$$= 2 \cos \left[\frac{p_x}{2\hbar} (a_2 - a_1) \right] \cos \left[\frac{p_x}{2\hbar} (a_1 + a_2 + 2d) \right].$$

$$v := (-1)^{m+1} \cos \frac{p_x}{\hbar} d + (-1)^{n+1} \cos \frac{p_x}{\hbar} (a_1 + a_2 + d) = -\cos \frac{p_x}{\hbar} d - \cos \frac{p_x}{\hbar} (a_1 + a_2 + d) =$$

$$= -2 \cos \left[\frac{p_x}{2\hbar} (a_1 + a_2) \right] \cos \left[\frac{p_x}{2\hbar} (a_1 + a_2 + 2d) \right].$$

$$u + v = 2\left\{\cos\left[\frac{p_x}{2\hbar}(a_2 - a_1)\right] - \cos\left[\frac{p_x}{2\hbar}(a_1 + a_2)\right]\right\} \cos\left[\frac{p_x}{2\hbar}(a_1 + a_2 + 2d)\right] =$$

$$= 4\operatorname{sen}\left(\frac{p_x}{2\hbar}a_1\right)\operatorname{sen}\left(\frac{p_x}{2\hbar}a_2\right)\cos\left[\frac{p_x}{2\hbar}(a_1 + a_2 + 2d)\right].$$

$$(A.2.9) :: \left(\Phi_m^{(1)}(p_x), p_y \Phi_n^{(2)}(p_x)\right) = \frac{\hbar q_{m,1} q_{n,2}}{\pi \sqrt{a_1 a_2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{4 \operatorname{sen}\left(\frac{p_x}{2\hbar} a_1\right) \operatorname{sen}\left(\frac{p_x}{2\hbar} a_2\right) \operatorname{cos}\left[\frac{p_x}{2\hbar} (a_1 + a_2 + 2d)\right]}{\left(p_x^2 - q_{m,1}^2\right) \left(p_x^2 - q_{n,2}^2\right)} p_y dp_x.$$

2. m y nimpares. Aquí \boldsymbol{u} no cambia y \boldsymbol{v} solo cambia de signo, luego

$$\begin{array}{rcl} u+v & = & 2\left\{\cos\left[\frac{p_x}{2\hbar}(a_2-a_1)\right]+\cos\left[\frac{p_x}{2\hbar}(a_1+a_2)\right]\right\}\cos\left[\frac{p_x}{2\hbar}(a_1+a_2+2d)\right]=\\ & = & 4\cos\left(\frac{p_x}{2\hbar}a_1\right)\cos\left(\frac{p_x}{2\hbar}a_2\right)\cos\left[\frac{p_x}{2\hbar}(a_1+a_2+2d)\right]. \end{array}$$

$$(\text{A.2.10}) \ \ \therefore \ \left(\Phi_m^{(1)}(p_x), p_y \Phi_n^{(2)}(p_x)\right) = \frac{\hbar q_{m,1} q_{n,2}}{\pi \sqrt{a_1 a_2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{4 \text{cos}\left(\frac{p_x}{2\hbar} a_1\right) \text{cos}\left(\frac{p_x}{2\hbar} a_2\right) \text{cos}\left[\frac{p_x}{2\hbar} (a_1 + a_2 + 2d)\right]}{\left(p_x^2 - q_{m,1}^2\right) \left(p_x^2 - q_{n,2}^2\right)} p_y \mathrm{d} p_x.$$

3. m par y n impar.

$$u = -\cos\frac{p_x}{\hbar}(a_2 + d) + \cos\frac{p_x}{\hbar}(a_1 + d) = 2\operatorname{sen}\left[\frac{p_x}{2\hbar}(a_2 - a_1)\right] \operatorname{sen}\left[\frac{p_x}{2\hbar}(a_1 + a_2 + 2d)\right].$$

$$v = -\cos\frac{p_x}{\hbar}d + \cos\frac{p_x}{\hbar}(a_1 + a_2 + d) = -2\operatorname{sen}\left[\frac{p_x}{2\hbar}(a_1 + a_2)\right] \operatorname{sen}\left[\frac{p_x}{2\hbar}(a_1 + a_2 + 2d)\right].$$

$$u + v = -2\left\{\operatorname{sen}\left[\frac{p_x}{2\hbar}(a_1 + a_2)\right] - \operatorname{sen}\left[\frac{p_x}{2\hbar}(a_2 - a_1)\right]\right\} \operatorname{sen}\left[\frac{p_x}{2\hbar}(a_1 + a_2 + 2d)\right].$$

$$(A.2.11) \qquad \qquad \therefore \quad \left(\Phi_{m}^{(1)}(p_{x}), p_{y}\Phi_{n}^{(2)}(p_{x})\right) = \\ = \frac{\hbar q_{m,1}q_{n,2}}{\pi\sqrt{a_{1}a_{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{-2\left\{\frac{p_{x}}{2\hbar}(a_{1}+a_{2})\right] - \sin\left[\frac{p_{x}}{2\hbar}(a_{2}-a_{1})\right]\right\} \sin\left[\frac{p_{x}}{2\hbar}(a_{1}+a_{2}+2d)\right]}{\left(p_{x}^{2}-q_{m,1}^{2}\right)\left(p_{x}^{2}-q_{n,2}^{2}\right)} p_{y} dp_{x}.$$

4. m impar y n par. Aquí u no cambia con respecto al caso anterior, y v sólo cambia de signo, luego

$$u+v = 2\left\{\operatorname{sen}\left[\frac{p_x}{2\hbar}(a_1+a_2)\right] + \operatorname{sen}\left[\frac{p_x}{2\hbar}(a_2-a_1)\right]\right\} \operatorname{sen}\left[\frac{p_x}{2\hbar}(a_1+a_2+2d)\right].$$

$$(A.2.12) \qquad \qquad \therefore \quad \left(\Phi_m^{(1)}(p_x), p_y \Phi_n^{(2)}(p_x)\right) = \\ = \frac{\hbar q_{m,1} q_{n,2}}{\pi \sqrt{a_1 a_2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2\left\{ \operatorname{sen}\left[\frac{p_x}{2\hbar}(a_1 + a_2)\right] + \operatorname{sen}\left[\frac{p_x}{2\hbar}(a_2 - a_1)\right] \right\} \operatorname{sen}\left[\frac{p_x}{2\hbar}(a_1 + a_2 + 2d)\right]}{\left(p_x^2 - q_{m,1}^2\right)\left(p_x^2 - q_{n,2}^2\right)} p_y \mathrm{d}p_x.$$

Ahora vemos que (A.2.9), (A.2.10), (A.2.11) y (A.2.12) sugieren tomar el caso particular (y trabajado en esta tesis) $a_1 = a_2$. Entonces,

$$\left(\Phi_m^{(1)}(p_x), p_y \Phi_n^{(2)}(p_x) \right) =$$

$$= \frac{\hbar q_m q_n}{\pi a} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p_x p_y}{(p_x^2 - q_m^2)(p_x^2 - q_n^2)} \times \left\{ \begin{array}{ll} 4\mathrm{sen}^2\left(\frac{p_x}{2\hbar}a\right) \cos\frac{p_x}{\hbar}(a+d) & m \neq n \text{ pares} \\ 4\mathrm{cos}^2\left(\frac{p_x}{2\hbar}a\right) \cos\frac{p_x}{\hbar}(a+d) & m \neq n \text{ impares} \\ -2\mathrm{sen}\left(\frac{p_x}{\hbar}a\right) \mathrm{sen}\frac{p_x}{\hbar}(a+d) & m \text{ par y } n \text{ impar} \\ 2\mathrm{sen}\left(\frac{p_x}{\hbar}a\right) \mathrm{sen}\frac{p_x}{\hbar}(a+d) & m \text{ impar y } n \text{ par} \end{array} \right\},$$

 $con q_n := \frac{n\pi\hbar}{a} y a := a_1 = a_2.$

APÉNDICE B

Distribuciones y análisis de Fourier

B.1. Distribuciones y "función" δ

En esta sección presentamos una herramienta que es muy importante para los físicos: la mal llamada "función" delta (de Dirac) δ . Para una variable real, la "función" $\delta(x)$ tiene la siguientes propiedades:

(B.1.1)
$$\delta(x) = 0 \text{ para } x \neq 0 \quad \text{y} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1.$$

Para cualquier función F(x) que no diverge alrededor de $x = x_0$, tenemos, por definición,

(B.1.2)
$$\int F(x)\delta(x-x_o)dx = F(x_0).$$

Existen muchas funciones que tienden a $\delta(x)$. Lo que se hace es considerar secuencias de funciones que dependen de un parámetro el cual determina su ancho. Aunque estas funciones no tienen límite en el sentido usual cuando sus anchos van a cero, la integral de sus productos con cualquier función que es regular en $x = x_0$ permanece bien definida y tiende al límite $F(x_0)$. Un ejemplo de estas funciones es

(B.1.3)
$$g_{\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp(-x^2/2\sigma^2),$$

y esto implica que $\int_{-\infty}^{\infty} F(x)g_{\sigma}(x)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2/2} F(\sigma y) dy$. Esta última integral permanece bien definida cuando $\sigma \to 0$ y da el resultado F(0). Cuando $\sigma \to 0$, g_{σ} "tiende" a $\delta(x)$.

Algunas de las propiedades de la delta de Dirac es que es una "función" par y que $\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$, donde a es real.

Definición. Las funciones de descenso rápido $\mathcal{L}(\mathbb{R})$ es el conjunto de funciones infinitamente diferenciables valuadas en los complejos $\varphi(x)$, x en los reales, tal que cuando x tiende a infinito, estas funciones y sus derivadas tienden a cero, más rápido que el inverso de cualquier polinomio de x.¹

Definición. Un funcional lineal continuo en el espacio $\mathcal{L}(\mathbb{R})$ es un mapeo de $\mathcal{L}(\mathbb{R})$ a los números complejos $(f : \mathcal{L}(\mathbb{R}) \to \mathbb{C})$, tal que para cada φ en $\mathcal{L}(\mathbb{R})$, corresponde un número complejo, denotado por $\langle f, \varphi \rangle$. Este mapeo tiene las siguientes propiedades:

a) Linealidad:

(B.1.4)
$$\langle f, \alpha_1 \varphi_1 + \alpha_2 \varphi_2 \rangle = \alpha_1 \langle f, \varphi_1 \rangle + \alpha_2 \langle f, \varphi_2 \rangle \quad \alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R} \ \ y \ \varphi_1, \varphi_2 \in \mathcal{L}(\mathbb{R}).$$

b) Continuidad: si la secuencia de funciones $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \ldots, \varphi_n$ en $\mathcal{L}(\mathbb{R})$ tiende a cero, la secuencia $\langle f, \varphi_1 \rangle, \langle f, \varphi_2 \rangle, \langle f, \varphi_3 \rangle, \ldots, \langle f, \varphi_n \rangle$ tiende a cero. Además, decimos que la secuencia φ_n tiende a cero si $x^k(\mathrm{d}/\mathrm{d}x)^{k'}\varphi_n$ tiende a cero uniformemente en x, para cualquier entero no negativo k y k'.

 $^{^{1}}$ La generalización a funciones de decaen rápidamente y que toman valores en \mathbb{R}^{n} se denota por $\mathcal{L}(\mathbb{R}^{n})$ (vea [51] secc. V.3).

Estos funcionales son llamados distribuciones moderadas y su conjunto es $\mathcal{L}'(\mathbb{R})^2$.

Considere los siguientes ejemplos:

1. Sea f(x) una función localmente integrable la cual permanece acotada por una potencia de |x| cuando $|x| \to \infty$. Podemos asociarla con un funcional, también denotado por f, usando la fórmula

(B.1.5)
$$\langle f, \varphi \rangle = \int f(x)\varphi(x)dx$$
 para cualquier φ en $\mathcal{L}(\mathbb{R})$.

2. La distribución delta de Dirac es el funcional que asocia el número $\varphi(0)$ con cualquier número $\varphi(x) \in \mathcal{L}(\mathbb{R})$. Esto se escribe como

(B.1.6)
$$\langle \delta, \varphi \rangle = \varphi(0).$$

Es conveniente para los físicos (pero incorrecto) escribir

$$\int \delta(x)\varphi(x)\mathrm{d}x = \varphi(0).$$

Así, el enunciado g_{σ} tiende a δ es incorrecto. Sin embargo, el enunciado $\langle g_{\sigma}, \varphi \rangle$ tiende a $\langle \delta, \varphi \rangle$ para cualquier $\varphi \in \mathcal{L}(\mathbb{R})$, es perfectamente correcto. Decimos que g_{σ} tiende a δ en el sentido de distribuciones.

Definición. Se define la derivada $\frac{df(x)}{dx}$, o f' de un funcional lineal arbitrario $f \in \mathcal{L}'(\mathbb{R})$ por la relación

(B.1.7)
$$\left\langle \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}, \varphi \right\rangle = -\left\langle f, \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x} \right\rangle.$$

Con esta definición podemos encontrar la derivada δ' de δ ,

(B.1.8)
$$\langle \delta', \varphi \rangle = -\langle \delta, \varphi' \rangle = -\varphi'(0),$$

que los físicos escribimos como $\int \delta'(x)\varphi(x)dx = -\varphi'(0)$.

B.2. Transformación de Fourier

Definición. Considere la función f(k) en el espacio $\mathcal{L}(\mathbb{R})$. Llamamos a la función g(x), definida por la integral

(B.2.1)
$$g(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(k)e^{ikx} dk,$$

la transformada de Fourier de la función f(k). Es claro, de la definición de $\mathcal{L}(\mathbb{R})$, que la integral existe y es infinitamente diferenciable con respecto a x. La generalización a varias variables $\overrightarrow{x} = (x_1, x_2, ..., x_n)$, $\overrightarrow{k} = (k_1, k_2, ..., k_n)$ es obvia. Sea $f(\overrightarrow{k}) \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^n)$, entonces

(B.2.2)
$$g(\overrightarrow{x}) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^n} \int f(\overrightarrow{k}) e^{i\overrightarrow{k} \cdot \overrightarrow{x}} d^n k.$$

La transformación de Fourier $f(k) \to g(x)$ es un mapeo de $\mathcal{L}(\mathbb{R})$ a $\mathcal{L}(\mathbb{R})$. Bajo un proceso a límite, se puede demostrar que esta transformación se puede invertir como sigue:

(B.2.3)
$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(x)e^{-ikx} dk.$$

²Note que $\mathcal{L}'(\mathbb{R})$ es es dual de $\mathcal{L}(\mathbb{R})$.

Entonces la transformación de Fourier es una transformación recíproca,

(B.2.4)
$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(x)e^{-ikx} dk \iff g(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(k)e^{ikx} dk.$$

Por esta razón, podemos decir indiscriminadamente que f(x) y g(x) son transformadas de Fourier una de la otra.

Un resultado importante del que hemos hecho uso en repetidas ocasiones a lo largo de esta tesis es el siguiente

Teorema. (Parseval-Plancherel) Considere dos funciones $f_1(k)$ y $f_2(k)$ en $\mathcal{L}(\mathbb{R})$, y sus transformadas de Fourier $g_1(x)$ y $g_2(x)$. Entonces se tiene que

(B.2.5)
$$\int f_1^*(k)f_2(k)dk = \int g_1^*(x)g_2(x)dx.$$

Uno se puede preguntar si la transformación de Fourier (B.2.1) solo existe en el espacio $\mathcal{L}(\mathbb{R})$. De hecho, existen ciertas funciones que no se pueden escribir como una transformada de Fourier en el sentido matemático usual, por lo cual nos vemos en la necesidad de mencionar las *condiciones suficientes para la existencia* ([5] secc. 2.1.1):

- 1. f debe ser absolutamente integrable en todo \mathbb{R} .
- 2. f debe tener sólo un número finito de discontinuidades y un número finito de máximos y mínimos en cualquier intervalo finito de \mathbb{R} .
 - 3. f no debe tener discontinuidades infinitas.

En general, cada una de estas condiciones puede ser debilitada a costo de fortalecer una o ambas condiciones compañeras.

Estas condiciones descartan la posibilidad de tener la transformada de Fourier de la "función" delta, al tener una discontinuidad infinita. Las funciones sen x y $\cos x$ quedan descartas debido a la condición 1.

Si la mayoría de las funciones de interés van a hacer incluidas en el contexto de la transformada de Fourier, se debe hacer una generalización de la definición (B.2.1). Esta generalización es posible extendiendo la definición de la transformación de Fourier al espacio $\mathcal{L}'(\mathbb{R})$ de distribuciones. De esta forma, es común encontrar una transformación con sentido de funciones que estrictamente no satisfacen las condiciones de existencia, bajo la premisa de que estas funciones puedan ser definidas como el límite de una secuencia de funciones que tienen transformada. Transformando cada función que es miembro de la secuencia, una secuencia correspondiente de transformadas se genera, y podemos llamar al límite de esta nueva secuencia la transformada generalizada de Fourier de la función original.

Los resultados (B.2.3) y (B.2.5) se pueden recuperar con una fórmula muy útil. Recordemos que la función $g_{\sigma}(k)$ en (B.1.3) tiende en el sentido de las distribuciones a $\delta(k)$ cuando $\sigma \to 0$. Por otro lado, podemos encontrar la transformada inversa de Fourier de $g_{\sigma}(k)$ y tomar el límite cuando $\sigma \to 0$. Se encuentra, bajo este límite, que

(B.2.6)
$$\delta(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} dx.$$

En mecánica cuántica, suele usarse una convención diferente para la transformada de Fourier (que es totalmente equivalente a la ya discutida, pues basta hacer un simple cambio de variable en las integrales).

Si $\psi(x)$ es el campo de Schrödinger (unidimensional), su transformada de Fourier $\Psi(p)$ se define por

(B.2.7)
$$\Psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}px} dx,$$

y su fórmula inversa es

(B.2.8)
$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(p) e^{\frac{i}{\hbar}px} dp.$$

Derivando (B.2.8) con respecto a x,

(B.2.9)
$$\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{ip}{\hbar} \Psi(p) \right] e^{\frac{i}{\hbar}px} \mathrm{d}p.$$

Esto significa que la transformada de Fourier de $\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}$ es $\frac{ip}{\hbar}\Psi(p).$

Bibliografía

- [1] FEYNMAN, R. P. et. al., The Feynman Lectures on Physics, Vol. 3, Addison-Wesley, Reading Ma, 1965, p. 1-1.
- [2] http://physicsweb.org/articles/world/15/9/2
- [3] HETCH, E., Óptica, 3ra Ed., Addison-Wesley Iberoamericana, Madrid, 2000.
- [4] BELTRÁN, V., Para atrapar un fotón, La ciencia para todos, Fondo de cultura económica, México, 1992.
- [5] GOODMAN, J. W. Introduction to Fourier Optics, McGraw-Hill, Nueva York, 2da. ed., 1996.
- [6] DE LA PEÑA, L. Albert Einstein, navegante solitario, La ciencia para todos, Fondo de cultura económica, México, 1987.
- [7] BRASDEN, B. H. y JOACHAIN, C. J., Introduction to quantum mechanics, Longman, 1989, p. 15.
- [8] PAIS, A., Rev. Mod. Phys. 51, 877-878 (1979). EINSTEIN, A., Phys. Z. 10, 817-825 (1909).
- [9] DE GORTARI, E., Suplementos del seminario de problemas científicos y filosóficos, Nueva Época, UNAM, México, 1988 (traducción de la Disertación Nobel de Louis De Broglie [12 de diciembre de 1929], la "Exposé Générale" [publicado en [10]], etc.).
- [10] DE BROGLIE, L., La Physique quantique restera-t-elle indéterministe?, París, Gauthier-Villars, 1953.
- [11] DAVIES, J. H., The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction, Cambridge U. P., 1998.
- [12] BALLENTINE, L. E. Quantum mechanics: a modern development, World Scientific P., 1998.
- [13] JÖNSSON, C. Zeitschrift für Physik 161, 454-474, 1961 (artículo original en alemán). JÖNSSON, C. Am. J. Phys., 42 4-11, 1974 (traducción parcial al inglés del artículo de 1961).
- [14] TAYLOR, G. I., Proc. of the Cambridge Philosophical Soc. 15, 114-115 (1909).
- [15] DIRAC, P. A. M., The Principles of Quantum Mechanics, Oxford University Press, 4th. edn., p. 9, 1958.
- [16] DONATI, O., MISSIROLI, G. F. y POZZI, G., Am. J. Phys. 41, 639 (1973).
- [17] MERLI, P. G., MISSIROLI, G. F., y POZZI, G., Am. J. Phys. 44, 306 (1976).
- [18] MÖLLENSTEDT, G. y DÜCKER, H., Naturwiss. 42, 41 (1954).
- [19] TONOMURA, A. et. al., Am. J. Phys. 57, 117-120 (1989).
- [20] SILVERMAN, M. P., More than one mistery. Explorations in Quantum interference. Springer Verlag, 1995, pp. 4-6.
- [21] ZEILINGER, A. et. al, Rev. Mod. Phys. 60, 1067-1073 (1988). GÄHLER, R. y ZEILINGER, A., Am. J. Phys. 59, 316-324 (1991).
- [22] CARNAL, O., y MLYNEK, J., Phys. Rev. Lett. 66, 2689-2692 (1991).
- [23] SHIMIZU, F. et. al., Phys. Rev. A 46, r17-20 (1992).
- [24] ARNDT, M. et. al., Nature 401, 680-682 (1999).
- [25] BREZGER, B. et. al., Phys. Rev. Lett. 88, 100404 (2002).
- [26] FEYNMAN, R. P., y HIBBS, A. R., Quantum Mechanics and Path Integrals. McGraw-Hill, Nueva York, 1965.
- [27] THALLER, B. Visual Quantum Mechanics. Springer-Verlag, Nueva York, 2000.
- [28] HILEY, B. J., y PEAT, F. D. (eds.), Quantum implications. Essays in honour of David Bohm. Ch. 9.
- [29] EINSTEIN, A., PODOLSKY, B., y ROSEN, N. Phys. Rev. 47, 777 (1935).
- [30] BOHR, N. Phys. Rev. 48, 696 (1935).
- [31] BELL, J. S. Physics 1, 195 (1964).
- [32] ASPECT, A. et. al. Phys. Rev. Lett. 49, 1804 (1982).
- [33] BALLENTINE, L. E., Am. J. Phys. 55, 785 (1987).
- [34] BOHM, D., Phys. Rev. 85-2, 166 (1952).
- [35] DE BROGLIE, L., The current interpretation of wave mechanics: a critical study, Elsevier, Amsterdam, 1964.
- [36] GOLDSTEIN, H. et al., Classical Mechanics, Addison Wesley, 3era. ed., 2002.
- [37] PHILIPPIDIS, C., DEWDNEY, C., y HILEY, B., Nuevo Cimento Soc. Ital. Fis., B 52, 15 (1979).
- [38] HOLLAND, P. y PHILIPPIDIS, C., Phys. Rev. A 67, 062105 (2003).

BIBLIOGRAFíA 88

- [39] DROZ-VICENT, P., Phys. Rev. D., 19 702 (1979). VIGIER, J.-P., y CUFARO-PETRONI, N., Phys. Lett., 93A, 383 (1983). BOHM, D., y HILEY, B. J., Found. Phys., 14, 255 (1984). DEWDNEY, C. et. al, Phys. Rev. D., 31, 2533, (1985).
- [40] HOLLAND, P., The quantum theory of motion: an account of the de Broglie-Bohm causal interpretation of quantum mechanics, Cambridge U. P., 1993.
- [41] JAMMER, M., The philosophy of Quantum Mechanics, Wiley Interscience, 1974.
- [42] NELSON, E., Quantum Fluctuations, Princeton Univ. Press, 1985.
- [43] DE LA PEÑA, L., Introducción a la Mecánica Cuántica. Ediciones Científicas Universitarias. Fondo de Cultura Económica, 2da. ed., México, 1991.
- [44] DE LA PEÑA, L., y CETTO, A. M., The quantum dice: an introduction to stochastic electrodynamics. Kluwer Academic, 1996.
- [45] COHEN-TANNOUDJI, C. et. al. Quantum Mechanics. Vol. II. John Wiley & Sons, N.Y. y Herman, París, 2da. ed., 1977.
- [46] JACKSON, J. D. Classical Electrodynamics. John Wiley & Sons, Inc., Nueva York, 3ra. ed., 1999.
- [47] COHEN-TANNOUDJI, C. et. al. Quantum Mechanics. Vol. I. John Wiley & Sons, N.Y. y Herman, París, 2da. ed., 1977.
- [48] GRIFFITHS, D. J. Introduction to Quantum Mechanics. Prentice-Hall, Inc., Nueva Jersey, 1995, secc. 2.5.
- [49] MATA-MENDEZ, O., CADILHAC, M. y PETIT, R. J., Opt. Soc. Am./Vol. 73, 328 (1983).
- [50] KOJIMA, T., J. Opt. Soc. Am. A/Vol. 7, 1740- (1990). MATA-MENDEZ, O. y CHAVEZ-RIVAS, F., J. Opt. Soc. Am. A/Vol. 12, 2440- (1995).
- [51] REED, M. SIMON, B. Methods of Modern Mathematical Physics. Vol. I. Functional Analysis (revised and enlarged edition). Academic Press, Inc., San Diego, California, 1980.