

EL TIEMPO COMO OBSERVABLE EN MECÁNICA CUÁNTICA

JOSÉ MUÑOZ GONZÁLEZ

Departamento de Química Física
Facultad de Ciencia y Tecnología
Universidad del País Vasco - Euskal Herriko Unibertsitatea

MEMORIA PRESENTADA PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR
PROGRAMA DE DOCTORADO DE “QUÍMICA”
Leioa, 2011

eman ta zabal zazu



Universidad
del País Vasco

Euskal Herriko
Unibertsitatea

Agradecimientos

Este trabajo está dedicado al Tiempo, por la edad que tengo intuyo que ya ha pasado más de la mitad del mío, así que aprovecharé un trocito del que me queda para agradecer y recordar a la gente que lo ha hecho posible.

En primer lugar, y muy especialmente, a mi director de tesis, J. Gonzalo Muga, por su dedicación, entusiasmo, capacidad para contagiarme con ánimos renovados en los momentos difíciles y por darme la oportunidad, a pesar de mis circunstancias personales, de trabajar en su grupo.

A las personas del Departamento de Química Física que han pasado por aquí durante estos años, Adolfo, Ion, Javi, Marisa, Ethel, Erik é Iñaki Bilbao que me han ayudado en todo lo que he podido necesitar. Algunos siguen por aquí, otros han comenzado nuevas etapas en sus vidas.

Por supuesto, este es un momento perfecto para acordarme de las personas ajenas a la universidad y cuyo apoyo ha sido decisivo para continuar, por esto y por mucho más me gustaría destacar muy especialmente a Amaya, Marina, Lutxo, a mis padres y a mi abuelo Marcelino. Hasta hoy, he pasado toda mi vida entre escuelas, colegios y universidades, hacer una lista de todos ellos alargaría en exceso este apartado. Sin embargo, me voy a permitir el lujo de mencionar a dos, la Escuela Fiscal Daniel Palacios de Guarumales y la Escuela Profesional Somorrostro que corrigieron mi camino gracias a un grupo de grandes maestros, mejores personas e incluso algunos de ellos, pasados ya muchos años, amigos: Edurne, Morquillas, Lidia, Román, Santi, Gilabert, Noguerol, Gonzalo, Arana, Manu, Raquel o Badiola. También tengo la suerte de contar con un grupo de personas, María Andrés, Carlos Lara, Asier, Fechu y Teresa, que durante todos estos años, y aunque no fueran conscientes de ello, me han facilitado mucho las cosas, aprovecho la oportunidad que tengo para agradecerles. También a la empresa donde trabajo, Saitec, incluyendo a mis compañeros. Y finalmente, un recuerdo a todos los “desintegrados” de la nave María Tijuana por hacerme más llevaderos los días oscuros.

Sin todos ellos ni esta tesis, y lo que es más importante, ni tampoco nada de lo demás habría sido posible.

Índice general

| | |
|---|-----------|
| 1. Introducción general sobre el tiempo en mecánica cuántica | 1 |
| 2. Tiempo de permanencia. Conceptos fundamentales | 5 |
| 2.1. Introducción | 5 |
| 2.2. El Operador Tiempo de Permanencia (TDP) | 7 |
| 2.3. La partícula libre | 10 |
| 2.3.1. Comparación entre los casos clásico y cuántico. | 14 |
| 2.4. TDP en una barrera de potencial | 16 |
| 2.4.1. La barrera rectangular de potencial | 17 |
| 2.4.2. TDP promedio a partir de medidas de la fluorescencia . | 19 |
| 3. Relación entre el TDP cuántico y las funciones de correlación flujo-flujo | 23 |
| 3.1. Funciones de correlación flujo-flujo estacionarias | 24 |
| 3.2. Funciones de correlación flujo-flujo dependientes del tiempo . . | 26 |
| 3.3. El movimiento libre | 28 |
| 3.4. Discusión | 30 |
| 4. Limitaciones a bajas velocidades de los relojes atómicos basados en átomos fríos | 35 |
| 4.1. Introducción | 35 |
| 4.2. Matrices de Transferencia y Probabilidad de excitación | 43 |
| 4.3. Desplazamientos debidos al movimiento cuántico | 44 |
| 4.4. Conclusiones | 48 |
| 5. Construcción de operadores de tiempo: covarianza, criterios de selección y ejemplos | 53 |
| 5.1. Introducción | 53 |
| 5.2. Covarianza de los operadores de tiempo. Notación. | 55 |
| 5.2.1. Operadores de tiempo de reloj | 55 |
| 5.2.2. Operadores tiempo de llegada | 58 |

| | | |
|-----------|---|-----------|
| 5.3. | Forma general de operadores de tiempo covariantes | 59 |
| 5.4. | Unicidad del operador de tiempo: inversión temporal, simetrías y varianza mínima | 62 |
| 5.5. | Aplicación a los tiempos de llegada | 64 |
| 5.5.1. | Partícula libre en el semi-espacio | 65 |
| 5.5.2. | Estados asintóticos y tiempo de retardo de Smith . . . | 67 |
| 5.6. | Aplicación a los operadores de Lyapunov en Mecánica Cuántica | 69 |
| 5.7. | Discusión y perspectivas | 73 |
| 5.8. | Apéndice: Varianza mínima y no-unicidad del operador de tiempo | 74 |
| 6. | Explicación y observación del fenómeno de Difracción en el Tiempo | 77 |
| 6.1. | Introducción | 77 |
| 6.2. | El modelo de fuente con decaimiento exponencial. | 79 |
| 6.3. | La esencia de la DET | 82 |
| 6.4. | Caracterización y observabilidad de DET | 84 |
| 6.5. | Independencia de los resultados respecto al modelo. | 88 |
| 7. | Conclusiones | 93 |
| 8. | Publicaciones de la Tesis | 97 |
| 9. | Apéndice Matemático | 99 |

Capítulo 1

Introducción general sobre el tiempo en mecánica cuántica

*But all the clocks in the city
Began to whirr and chime:
Ó let not Time deceive you,
You cannot conquer Time.*

W. H. Auden

En contraste con su papel dominante en la teoría de la relatividad, el tiempo en la teoría cuántica, después de unos primeros tanteos de Bohr y los grupos fundadores de Gotinga y Copenhague en los años veinte del pasado siglo, quedó relegado esencialmente, en escritos filosóficos y tratamientos teóricos de las siguientes décadas, a su aspecto paramétrico. Pauli y su famoso “teorema” de 1933 sobre la imposibilidad de asociarlo con un operador autoadjunto para sistemas con Hamiltoniano de espectro discreto o semiacotado, que son la mayoría de los sistemas de interés físico, proporcionaron para muchos físicos, una base suficiente para justificar el abandono teórico del tiempo como observable. Sin embargo, durante todos estos años de aplicaciones y desarrollo de la teoría cuántica, los laboratorios no han dejado de observar fenómenos que se manifiestan singularmente a lo largo del tiempo, mediante eventos que ocurren en instantes bien definidos (en una escala mucho menor que la de la duración temporal de la función de onda) y aleatorios. Si entendemos por “observable” en un sentido amplio, cualquier magnitud medible cuya descripción estadística como variable aleatoria es reproducible mediante repeticiones del experimento basado en una misma preparación del sistema, debemos concluir que existen de hecho muchos observables temporales, y que los libros de texto sobre mecánica cuántica no proporcionan un tratamiento

teórico adecuado. Uno de los ejemplos más importantes, por su, al menos aparente, sencillez, y por su cotidianeidad, es el tiempo de llegada a un detector. En laboratorios de física atómica o molecular, las partículas pueden prepararse, incluso individualmente, en condiciones esencialmente iguales, y después lanzarse, o desplazarse hacia el detector en el que los instantes de llegada se identifican como “*clics*” bien definidos. Se obtienen también sus correspondientes distribuciones. Estas llegadas, como se ha demostrado, responden además a patrones perfectamente cuánticos, ya que en el perfil de la distribución temporal se pueden producir interferencias y difracción en el tiempo, análogas a las que se observan espacialmente cuando, por ejemplo, en la emisión intervienen, no ya dos rendijas en posiciones distintas, sino ventanas temporales de apertura de la fuente centradas en distintos instantes. El tiempo de llegada de partículas cuánticas se ha estudiado teóricamente de forma esporádica desde los años sesenta, y de manera más sistemática e intensa durante los últimos diez años, mientras que la teoría de la difracción en el tiempo se remonta al trabajo pionero de Moshinsky en 1952. Estos temas se estudian en dos capítulos de la tesis que resumen las aportaciones de mi trabajo, y presentan también una exposición más detallada de los hitos históricos más relevantes.

El observable temporal más fundamental, de hecho el único verdaderamente esencial para nuestro quehacer diario es el tiempo del reloj. Desde un punto de vista formal algunas características del tiempo del reloj son muy semejantes al tiempo de llegada. Los relojes cuánticos son sistemas cuánticos que se desplazan lineal o periódicamente con el tiempo. Al observar la posición del sistema en un instante dado, deducimos “qué hora –o qué milisegundo– es” y, en general, el tiempo transcurrido desde algún origen predeterminado, pero la observación está sujeta a la misma aleatoriedad inherente al tiempo de llegada. Estas analogías se estudian en el mismo capítulo dedicado al tiempo de llegada. En la práctica, el tiempo que producen los metrologos en los Institutos oficiales de tiempo y frecuencia, si bien descansa internamente, como veremos, en toda una batería de efectos cuánticos, no se deduce de relojes cuánticos definidos en el sentido anterior. Lo que de verdad se persigue en metrología es establecer con extremada precisión y estabilidad la frecuencia de una transición entre niveles del átomo de Cesio para reproducirla mediante osciladores macroscópicos de cuarzo. El segundo se define contando simplemente un número de estas oscilaciones acordado convencionalmente. La búsqueda de un tiempo cada vez más preciso ha llevado a diseñar relojes basados en átomos ultrafríos cuyo movimiento traslacional es extremadamente lento. En otro capítulo de la Tesis analizamos los efectos cuánticos de este tipo de movimiento en la precisión del reloj.

La prolongada anestesia paralizante del teorema de Pauli, que en reali-

dad se formuló sin rigor matemático en una breve nota a pie de página, como ha discutido Eric Galapon ampliamente [76], y cuyas consecuencias más dramáticas son técnicamente evitables mediante medidas positivas operador-valoradas (“*positive operator valued measurements*” o POVM) no ha facilitado tampoco el examen de operadores que describan “duraciones”. Estos operadores conmutan con el Hamiltoniano, y por tanto no están en realidad sujetos al dominio de aplicación del teorema. El tiempo de permanencia de una partícula en una zona espacial, o más generalmente de un sistema en un subespacio del espacio de Hilbert, vienen representados por operadores autoadjuntos y por tanto constituirían según las clasificación de von Neumann, perfectos “observables”. Sin embargo Wigner señaló con acierto que esta acepción del término “observable” es problemática, y colisiona con la del lenguaje ordinario, puesto que no es en absoluto evidente cómo proceder en el laboratorio para realmente “observar” las distribuciones de valores propios de muchos operadores autoadjuntos, ni la teoría proporciona ningún tipo de receta automática para conseguirlo. El tiempo de permanencia se define y mide sin problema conceptual o de principio en sistemas clásicos pero se enfrenta en el mundo cuántico con la ausencia de trayectorias. Su interpretación operacional, es decir, en términos de manipulaciones concretas en el laboratorio que proporcionen la distribución estadística, es una cuestión abierta a la que dedico dos capítulos de la Tesis.

El cuerpo de esta Tesis doctoral se articula por tanto en torno a cuestiones físicas fundamentales para las que hemos intentado encontrar respuestas también fundamentales. En cualquier caso, y a pesar de no constituir el objetivo central del trabajo, he intentado también establecer vínculos con consecuencias experimentales y/o tecnológicas. En algunos casos, como en el estudio de los relojes atómicos, son evidentes, y en otros pueden requerir avances o trabajos aún no realizados. En este sentido, parecen particularmente prometedoras las posibilidades de desarrollar la difracción en el tiempo como una herramienta práctica de análisis y extracción de información a través de analogías temporales de técnicas bien conocidas como la holografía o la espectrometría mediante redes de difracción.

Quiero comentar finalmente un par de asuntos técnicos:

- La notación es consistente dentro de cada capítulo, pero no necesariamente entre capítulos distintos. He elegido esta opción para respetar en lo posible la notación de los artículos originales y facilitar su consulta, teniendo en cuenta además la relativa independencia y autoconsistencia de los capítulos, con excepción de la estrecha relación de los capítulos 2 y 3.
- Para las referencias he optado por el orden alfabético al final de la Tesis.

INTRODUCCIÓN GENERAL SOBRE EL TIEMPO EN MECÁNICA
CUÁNTICA

Capítulo 2

Tiempo de permanencia. Conceptos fundamentales

You think quantum physics has the answer? I mean, you know, what purpose does it serve for me that time and space are exactly the same thing? I mean I ask a guy what time it is, he tells me 6 miles? What the hell is that?

Woody Allen

En este capítulo se revisan algunos aspectos fundamentales y formales del Tiempo de permanencia (TDP) de una partícula cuántica en una región del espacio, y se ejemplifican mediante los casos de movimiento libre y de colisión con una barrera de potencial; se discuten también algunas extensiones del concepto [79].

2.1. Introducción

Como he señalado en la Introducción de la Tesis, a pesar de que las mediciones de distintos tiempos (duraciones o instantes) son comunes en los laboratorios, las cuestiones fundamentales sobre el tiempo en la mecánica cuántica apenas se han abordado, lo que se suele justificar mediante el teorema de Pauli. Alternativamente, se ha puesto el énfasis en tiempos característicos, cantidades temporales que caracterizan un proceso, tales como el tiempo de escape o decaimiento. Esto es en cierto modo contrario al procedimiento

habitual en la mecánica cuántica, donde, además del valor medio de una cantidad, se requiere la predicción de los momentos de orden superior, en otras palabras, la distribución de probabilidad.

Con respecto al observable tiempo de llegada, se han estudiado y propuesto varias de esas distribuciones, véase el volumen 1 de “Time in Quantum Mechanics” [77] o [75].

En este capítulo analizamos el tiempo de permanencia, que podemos considerar uno de los observables de tiempo más simples cuyo operador asociado es de hecho auto-adjunto sobre un dominio adecuado. A primera vista, esta propiedad parece contradecir el teorema de Pauli, que afirma que no puede existir ningún observable del tiempo, asociado a un operador auto-adjunto que cumpla las reglas de conmutación canónica con un Hamiltoniano discreto semi-acotado. Sin embargo, el TDP es una duración o cantidad *intervalo*, en contraposición a la cantidad *instante* que describe el tiempo de llegada. Su operador asociado, por lo tanto, debería simplemente *conmutar* con el Hamiltoniano, en vez de ser su canónico conjugado.

El TDP de una partícula en una región del espacio y su pariente cercano, el tiempo de retardo [101], son cantidades fundamentales que caracterizan la duración de los procesos de colisión, el tiempo de vida de los sistemas inestables [27], la respuesta a las perturbaciones [50], la conductancia-ac en conductores mesoscópicos [16], o las propiedades de las colisiones caóticas [78]. Además, la importancia del TDP y del tiempo de retardo se debe también a su relación con la densidad de estados, y el desarrollo del virial en mecánica estadística [19]. Como muestra de los estudios teóricos sobre el TDP cuántico véanse [27, 50, 107, 11, 58, 19, 102, 24, 121, 77, 61, 119, 51, 104, 9, 70, 105]. Aquí nos centraremos en algunos aspectos fundamentales, pero hasta ahora pasados por alto, como la posibilidad de realizar mediciones del TDP y las implicaciones físicas de su distribución, así como de su segundo momento.

A pesar de las agradables propiedades del operador del TDP, de la importancia del concepto, y del valor medio en diferentes ámbitos, o de la aparente simplicidad formal señalada anteriormente, el TDP es, en realidad, sutil y desafiante. En particular, una medida suficientemente directa y no invasiva, que permita obtener los momentos estadísticos a partir de valores individuales, aún no se ha descubierto. Si se detecta la partícula (y, por tanto, se localiza) a la entrada de la región de interés, su función de onda se modifica (“colapsa”), de modo que el tiempo transcurrido hasta la detección, cuando abandona la región, no reproduce la distribución ideal del operador TDP, y dependerá de los detalles del método de localización. Palao et al. [85] y Ruschhaupt [91] han propuesto modelos de medidas del tiempo de paso que estudian el efecto de la localización. Otros intentos se basan en utilizar grados de libertad auxiliares que actúen como relojes o cronómetros mientras la partícula se

mueva en la región estudiada [105, 2]. Todos los enfoques operacionales del TDP cuántico conocidos hasta ahora han proporcionado sólo su valor medio, y de manera indirecta, deduciéndolo a partir de su relación teórica con otros observables cuyo valor medio es directamente medible. El valor medio se obtiene, por ejemplo, con un “reloj de Larmor”, utilizando un campo magnético débil y homogéneo en la región D , y la rotación del spin de una partícula incidente con spin- $\frac{1}{2}$ [7, 95, 13]. Un análogo óptico lo proporciona el “reloj de Rabi” [10]. También se puede deducir a partir del valor medio del tiempo de paso por las fronteras de la región del espacio estudiada [70], o a partir de la absorción total cuando un potencial complejo absorbente actúa en la región [36, 48, 72]. Esta último método podría aplicarse con átomos fríos y láseres como se describe en [24, 92] y se discute en la Sección 2.4.2.

La estructura del capítulo es la siguiente: la sección 2.2 está dedicada a puntos básicos y formales, y las secciones 2.3 y 2.4 a ejemplos concretos: la partícula libre y la barrera de potencial.

2.2. El Operador Tiempo de Permanencia (TDP)

A diferencia de otras cantidades de tiempo, existe un amplio consenso sobre la representación del TDP como operador [27, 50]. Para una partícula que evoluciona en el tiempo bajo la acción de un Hamiltoniano \hat{H} en la región D , que hemos limitado aquí, por simplicidad, a una dimensión, $D = \{x : x_1 \leq x \leq x_2\}$, toma la forma

$$\hat{T}_D = \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{\chi}_D(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\hat{H}t/\hbar} \chi_D(\hat{x}) e^{-i\hat{H}t/\hbar}, \quad (2.1)$$

donde

$$\hat{\chi}_D(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \int_{x_1}^{x_2} dx |x\rangle \langle x| e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (2.2)$$

es el proyector (en la representación de Heisenberg) sobre D , y $\chi_D(\hat{x}) = \hat{\chi}_D(0) = \int_{x_1}^{x_2} dx |x\rangle \langle x|$. Sin ahondar demasiado en los detalles matemáticos, es decir, en la correcta descripción de su dominio y de su adjunto, podemos ver que \hat{T}_D es autoadjunto (vamos a volver a este asunto después de estudiar la partícula libre en la Sección 2.3).

En cualquier caso, está claro que, al menos formalmente, este operador

conmuta con el Hamiltoniano, tal como se desprende de lo siguiente:¹

$$\begin{aligned} \widehat{T}_D e^{-i\widehat{H}t/\hbar} &= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\widehat{H}\tau/\hbar} \chi_D(\widehat{x}) e^{-i\widehat{H}(\tau+t)/\hbar} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\widehat{H}(\tau-t)/\hbar} \chi_D(\widehat{x}) e^{-i\widehat{H}\tau/\hbar} = e^{-i\widehat{H}t/\hbar} \widehat{T}_D. \end{aligned} \quad (2.3)$$

La conmutación de \widehat{T}_D y el Hamiltoniano nos lleva a la búsqueda de los autoestados del TDP en el espacio propio estacionario de \widehat{H} . Sea α el índice de degeneración de estos autoestados, tal que $\widehat{H}|E, \alpha\rangle = E|E, \alpha\rangle$. Fácilmente obtenemos los elementos de la matriz del operador \widehat{T}_D en el correspondiente espacio propio,²

$$\widehat{T}_D|E, \alpha\rangle = 2\pi\hbar \sum_{\beta} \langle E, \beta | \chi_D(\widehat{x}) | E, \alpha \rangle |E, \beta\rangle. \quad (2.4)$$

Podemos por lo tanto, reducir el problema de valores propios y autoestados del operador TDP a un conjunto de problemas de diagonalización de matrices en cada uno de los subespacios propios del Hamiltoniano. Vamos a suponer que el Hamiltoniano tiene un espectro puramente continuo con autoestados de colisión degenerados (delta-normalizado) $|\phi_{\pm k}\rangle$ correspondiente a ondas planas incidentes $|\pm k\rangle$, con energía $E = k^2\hbar^2/(2m)$, normalizadas como $\langle k|k'\rangle = \langle\phi_k|\phi_{k'}\rangle = \delta(k - k')$.

Siguiendo la misma manipulación realizada para el operador S en la teoría de colisiones en una dimensión [70], es conveniente definir en la *capa de energía* una matriz TDP 2×2 , \mathbb{T} , factorizando una delta de energía,³

$$\langle\phi_k|\widehat{T}_D|\phi_{k'}\rangle = \delta(E - E') \frac{|k|\hbar^2}{m} \mathbb{T}_{kk'}, \quad (2.5)$$

donde $E' = k'^2\hbar^2/(2m)$ y⁴

$$\mathbb{T}_{kk'} = \langle\phi_k|\chi_D(\widehat{x})|\phi_{k'}\rangle \frac{2\pi m}{|k|\hbar}, \quad E = E'. \quad (2.6)$$

Como caso particular, \mathbb{T}_{kk} es el promedio del TDP en una región finita del espacio definido por Büttiker en el régimen estacionario como [13],⁵

$$\mathbb{T}_{kk} = \frac{1}{|j(k)|} \int_{x_1}^{x_2} dx |\phi_k(x)|^2, \quad (2.7)$$

¹Versiones del operador TDP con limitaciones temporales tales como $\int_0^\infty dt e^{i\widehat{H}t/\hbar} \chi_D(\widehat{x}) e^{-i\widehat{H}t/\hbar}$, no conmutan en general con \widehat{H} , véase [27]

²Véase su obtención en el Apéndice Matemático.

³Véase su obtención en el Apéndice Matemático.

⁴Véase su obtención en el Apéndice Matemático.

⁵Véase su obtención en el Apéndice Matemático.

donde $j(k)$ es el flujo entrante asociado con $|\phi_k\rangle$.

Una peculiaridad interesante del TDP cuántico es que la diagonalización de \mathbb{T} a una determinada energía proporciona, en general, dos valores propios $t_{\pm}(k)$, $k > 0$, y los correspondientes autoestados $|t_{\pm}(k)\rangle$, incluso en los casos en que sólo existe un tiempo clásico, como en el movimiento libre, o la transmisión sobre la barrera. (Se examinan a continuación algunos ejemplos concretos.) Una consecuencia es una varianza mayor de la distribución cuántica del TDP comparada con la clásica.

La distribución cuántica del TDP para un estado $|\psi\rangle = |\psi(t=0)\rangle$, viene dada, formalmente, por

$$\Pi_{\psi}(\tau) = \langle\psi|\delta(\widehat{T}_D - \tau)|\psi\rangle, \quad (2.8)$$

ya que el carácter de “auto-adjunto” del TDP implica que se aplica el teorema espectral, y que las potencias del operador se corresponden con los momentos de la distribución. No vamos a considerar en este trabajo otras fuentes de fluctuaciones tales como los estados mezclados o conjuntos de Hamiltonianos. En estos dos casos, se pueden calcular distribuciones de promedios de TDP, mientras que aquí vamos a estudiar la distribución del propio TDP, pero solo para estados cuánticos puros y un único Hamiltoniano.

En el cálculo de la distribución del TDP nos encontramos con la dificultad mencionada anteriormente, de que el TDP es degenerado. Es útil en este caso ayudarse del teorema espectral para calcular la función generadora de la distribución del TDP, que se define como

$$f_{\psi}(\omega) = \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \Pi_{\psi}(t) = \langle\psi|e^{i\omega\widehat{T}_D}|\psi\rangle. \quad (2.9)$$

Normalizando los autoestados del TDP para escribir la resolución de la identidad

$$\widehat{1} = \sum_{\alpha} \int_0^{\infty} dk |t_{\alpha}(k)\rangle\langle t_{\alpha}(k)|, \quad (2.10)$$

f_{ψ} puede escribirse como

$$\begin{aligned} f_{\psi}(\omega) &= \int_0^{\infty} dk \left[e^{i\omega t_+(k)} \langle\psi|t_+(k)\rangle\langle t_+(k)|\psi\rangle \right. \\ &\quad \left. + e^{i\omega t_-(k)} \langle\psi|t_-(k)\rangle\langle t_-(k)|\psi\rangle \right], \end{aligned} \quad (2.11)$$

y, por tanto,

$$\begin{aligned} \Pi_{\psi}(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} f_{\psi}(\omega) \\ &= \int_0^{\infty} dk \left[\delta(t - t_+) |\langle\psi|t_+\rangle|^2 + \delta(t - t_-) |\langle\psi|t_-\rangle|^2 \right]. \end{aligned} \quad (2.12)$$

El promedio del TDP para un paquete de ondas se puede dar en términos de la densidad de probabilidad de posición, correspondiente (a diferencia de su segundo momento, como se muestra a continuación) a la expresión válida para un colectivo de partículas clásicas⁶ (véase [49, 71]),

$$\langle \psi | \widehat{T}_D | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{x_1}^{x_2} dx |\psi(x, t)|^2 = \int_0^{\infty} dk |\langle k | \psi^{in} \rangle|^2 \mathbb{T}_{kk}, \quad (2.13)$$

donde $\psi(x, t) = \int_0^{\infty} dk \langle \phi_k | \psi \rangle \exp(-i\hbar k^2 t / 2m) \phi_k(x)$ es el paquete de ondas dependiente del tiempo y se supone, aquí y en el resto del capítulo, que se compone de momentos incidentes positivos. Para escribir la Ec. (2.13) hemos usado la relación estándar $\langle \phi_k | \psi \rangle = \langle k | \psi^{in} \rangle$, donde $\langle x | k \rangle = (2\pi)^{-1/2} \exp(ikx)$, y ψ^{in} es el estado asintóticamente libre de ψ .

El segundo momento tiene la forma, para paquetes de onda incidentes con componentes de momentos positivos,⁷

$$\begin{aligned} \langle \widehat{T}_D^2 \rangle &= \int_0^{\infty} dk (\mathbb{T}^2)_{kk} |\langle k | \psi^{in} \rangle|^2 = \int_0^{\infty} dk (|\mathbb{T}_{kk}|^2 + |\mathbb{T}_{k-k}|^2) |\langle k | \psi^{in} \rangle|^2 \\ &= \int_0^{\infty} dk \frac{4\pi^2 m^2}{\hbar^2 k^2} \\ &\times \left[\left(\int_{x_1}^{x_2} dx |\phi_k(x)|^2 \right)^2 + \left| \int_{x_1}^{x_2} dx \phi_k^*(x) \phi_{-k}(x) \right|^2 \right] |\langle k | \psi^{in} \rangle|^2, \end{aligned} \quad (2.14)$$

que presenta un término sin contrapartida clásica.

2.3. La partícula libre

Ilustraremos los resultados anteriores con la solución explícita del caso de una partícula libre en una región D que se extiende desde $x_1 = 0$ a $x_2 = L$. De hecho, la humilde partícula libre en movimiento resulta ser un sistema muy interesante y sorprendentemente complejo en lo que se refiere al TDP. El Hamiltoniano de la partícula libre es doblemente degenerado, y podemos hacer coincidir los índices de la degeneración con el signo del momento. Con la debida atención a las diferentes normalizaciones de los autoestados de la energía y el momento, encontramos los siguientes autoestados del operador TDP⁸:

$$|t_{\pm}(k), D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|k\rangle \pm e^{ikL} | -k\rangle], \quad (2.15)$$

⁶Véase su obtención en el Apéndice Matemático.

⁷Véase su obtención en el Apéndice Matemático.

⁸Véase su obtención en el Apéndice Matemático.

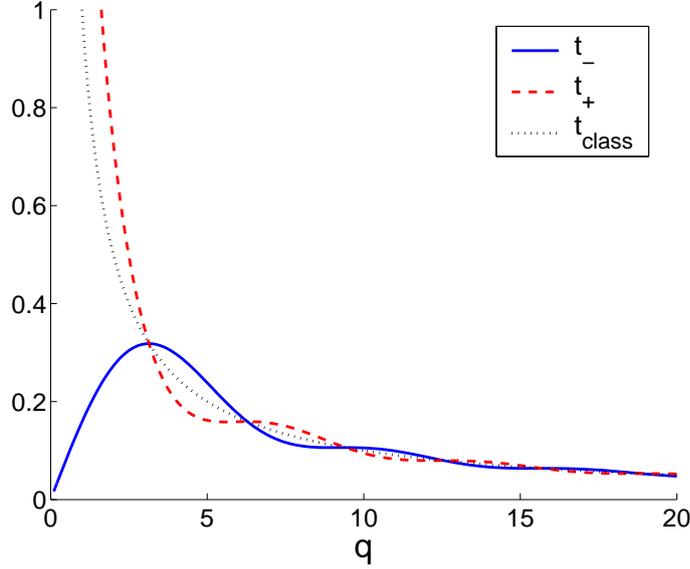


Figura 2.1: Autovalores del operador TDP en función de $q = kL$, en unidades mL^2/\hbar , para el movimiento libre de una partícula dentro de una región de longitud L .

donde⁹

$$t_{\pm}(k) = \frac{mL}{k\hbar} \left(1 \pm \frac{1}{kL} \sin kL \right) \quad (2.16)$$

son los autovalores correspondientes, en claro contraste con el tiempo clásico $t_{\text{class}} = mL/(|k|\hbar)$, véase la Fig. 2.1.

Es importante señalar que la función inversa es multivaluada. Debido a esto hemos mantenido los autoestados generalizados con la dimensionalidad de $|k\rangle$, en lugar de normalizarlos de acuerdo con una función delta de TDP. Con esta normalización es fácil comprobar que la resolución de la identidad tiene la forma (2.10).

Obsérvese que $t_{-}(k)$ tiende a cero cuando $k \rightarrow 0$, uno efecto cuántico más que se entiende mejor a partir de la representación en coordenadas de los autoestados,

$$\begin{aligned} \langle x|t_{+}\rangle &= \frac{e^{ikL/2}}{\pi^{1/2}} \cos[k(x - L/2)], \\ \langle x|t_{-}\rangle &= \frac{ie^{ikL/2}}{\pi^{1/2}} \sin[k(x - L/2)], \end{aligned} \quad (2.17)$$

simétrico y antisimétrico respecto al intervalo central. $\langle x|t_{-}\rangle$ se anula en $L/2$,

⁹Véase su obtención en el Apéndice Matemático.

por lo que la densidad de partículas tiende a anularse en D al aumentar la longitud de onda cuando $k \rightarrow 0$.

El operador TDP para un intervalo $D' = [a, a + L]$ se obtiene del anterior por traslación,

$$\widehat{T}_{D'} = e^{-ia\widehat{k}}\widehat{T}_D e^{ia\widehat{k}}, \quad (2.18)$$

y, en consecuencia, los valores propios no se modifican, mientras que los nuevos autoestados se calculan fácilmente,

$$\begin{aligned} |t_{\pm}(k), D'\rangle &= e^{-ia\widehat{k}}|t_{\pm}(k), D\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{-iak}|k\rangle \pm e^{ik(a+L)}|-k\rangle]. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Es sencillo calcular directamente la acción de \widehat{T}_D en la representación k ,

$$\langle k|\widehat{T}_D|\psi\rangle = \frac{mL}{|k|\hbar} \left[\widetilde{\psi}(k) + e^{-ikL} \frac{1}{kL} \sin(kL) \widetilde{\psi}(-k) \right], \quad (2.20)$$

donde $\widetilde{\psi}(k) = \langle k|\psi\rangle$. Esto nos permite estudiar los aspectos funcionales del operador. En particular, puede comprobarse, mediante la exigencia de normalización, que el dominio del operador viene dado por las funciones que satisfacen $\widetilde{\psi}(k)/k \rightarrow 0$ cuando $k \rightarrow 0$. El requisito de simetría no añade más limitaciones al dominio. En cuanto a los índices de deficiencia, resultan ser $(0, 0)$. Estos cálculos son para el intervalo $D = [0, L]$, pero, dada la equivalencia unitaria de otros intervalos de la misma longitud, véase la Ec. (2.18), los mismos resultados se obtienen para regiones compuestas de un número arbitrario de intervalos cerrados.

No es de extrañar que las funciones en el dominio del operador TDP para la partícula libre deban anularse en $k = 0$ lo suficientemente rápido, ya que la evolución característica de una función de onda genérica viene dictada por el propagador de la partícula libre, que se comporta como $t^{-1/2}$. Esto implica la divergencia del TDP a menos que el estado excluya la componente $k = 0$ y el decaimiento de $\widetilde{\psi}(k)$ sea suficientemente rápido cuando $k \rightarrow 0$ (un análisis simple de la divergencia puede encontrarse en [23]). La divergencia del TDP para estados con componentes no nulos en $k = 0$ también ocurre para colectivos de partículas clásicas.

Para calcular la distribución $\Pi_{\psi}(t)$, véanse las Ecs. (2.11) y (2.12), utilizamos la función característica

$$\begin{aligned} f_{\psi}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{i\omega mL/(|k|\hbar)} \cos \left[\frac{\omega m}{k^2 \hbar} \sin(kL) \right] |\widetilde{\psi}(k)|^2 \\ &+ i \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{i\omega mL/(|k|\hbar)} \sin \left[\frac{\omega m}{|k|k\hbar} \sin(kL) \right] e^{-ikL} \widetilde{\psi}(k) \overline{\widetilde{\psi}(-k)} \end{aligned} \quad (2.21)$$

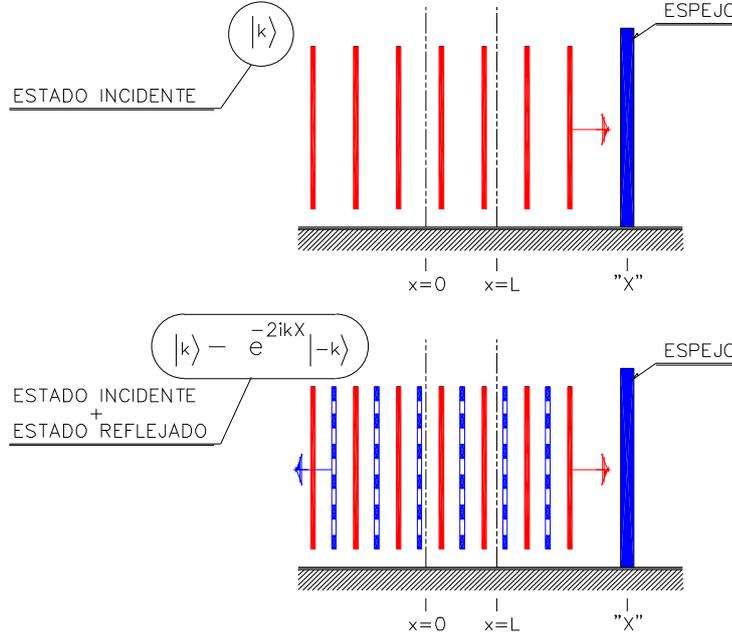


Figura 2.2: Espejo de ondas de materia. La onda plana incidente, $|k\rangle$, (línea continua roja) se refleja, $| -k\rangle$, (línea discontinua azul) incorporando un factor de fase.

La distribución $\Pi_\psi(t)$ solo existe en el semi-eje positivo, como puede verse en la expresión explícita de los valores propios. Esto, a su vez, es una comprobación no trivial de la validez de la definición.

Otro resultado de este análisis, inicialmente sorprendente, es que para paquetes de onda muy monocromáticos (es decir, altamente concentrados en un punto en la representación de momentos), la densidad de probabilidad para el TDP es genéricamente bimodal debido a los dos valores propios $t_\pm(k)$ de la Ec. (2.16).

Una verificación experimental de los autovalores, y de la naturaleza cuántica del TDP, podría realizarse con la ayuda de un espejo de ondas de materia situado en un punto $X > L$, Fig (2.2), que refleje una onda plana incidente $|k\rangle$. La onda resultante tomará la forma, salvo por un factor de fase,

$$|\psi_X\rangle = |k\rangle - e^{-2ikX} | -k\rangle. \quad (2.22)$$

Podemos ahora calcular el TDP entre 0 y L ,

$$\begin{aligned} \langle \psi_X | \hat{T}_D | \psi_X \rangle &= T_{kk} + T_{-k-k} - 2\text{Re}(e^{-2ikX} T_{k-k}) \\ &= 2 \frac{Lm}{|k|\hbar} \left\{ 1 - \cos[k(L + 2X)] \frac{\sin(kL)}{kL} \right\}, \end{aligned} \quad (2.23)$$

que oscila entre los valores máximo y mínimo $2t_{\pm}$, véase (2.16). Estos se producen en posiciones específicas del espejo, es decir,

$$X_- = -\frac{L}{2} + \frac{\pi n}{k}, \quad (2.24)$$

$$X_+ = -\frac{L}{2} + \frac{\pi n}{k} + \frac{\pi}{2k}, \quad (2.25)$$

(n entero tal que $X > L$), para las cuales la onda $|\psi_X\rangle$ se hace proporcional a $|t_{\pm}\rangle$. El factor de proporcionalidad 2 se debe a que el extremo corresponde al *doble* de los autovalores, lo cual es fácil de interpretar físicamente con referencia al correspondiente escenario clásico: la partículas clásicas bajo similares circunstancias atraviesan la región dos veces, primero hacia la derecha y luego hacia la izquierda. Para cualquier X entre los valores privilegiados X_{\pm} dados antes, $|\psi_X\rangle$ es una superposición lineal de los autoestados del TDP y así el promedio resultante del TDP se encuentra en un continuo entre los dos autovalores. En el experimento que proponemos, se envía un haz continuo monocromático hacia el espejo y se mide la densidad de partículas entre 0 y L mediante fluorescencia o por otros medios. Las oscilaciones de la señal en función de X contrastarían con el caso clásico, en el que la densidad del haz y el TDP no se ven afectados por un cambio de la posición del espejo.

2.3.1. Comparación entre los casos clásico y cuántico.

Ya hemos discutido algunas de las peculiaridades del TDP cuántico comparado con el TDP clásico. Aquí elaboraremos esta comparación con más detalle. Consideremos primero un colectivo clásico de partículas, descrito por la densidad de probabilidad inicial en el espacio de fases, $F(x, p)$. La distribución del TDP para este caso viene dada por

$$\begin{aligned} \Pi_{\text{class}}(t) &= \int dx dp \delta\left(t - \frac{mL}{|p|}\right) F(x, p) \\ &= \frac{mL}{t^2} \int dx \left[F\left(x, \frac{mL}{t}\right) + F\left(x, \frac{mL}{-t}\right) \right], \end{aligned} \quad (2.26)$$

es decir, la distribución marginal de momentos evaluada en mL/t y $-mL/t$, y multiplicada por el factor de normalización mL/t^2 . Por otro lado, la distribución (2.12) obtenida a partir de la Ec. (2.21) incluye efectos de interferencia entre componentes con momentos negativos y positivos, de dos diferentes formas. En primer lugar, hay una interferencia obvia en la última línea de (2.21); pero además de esto, el argumento del coseno también revela estos efectos. Para ver mejor este punto, examinemos un operador diferente,

$$\hat{t}_D := \hat{\lambda}_+ \hat{T}_D \hat{\lambda}_+ + \hat{\lambda}_- \hat{T}_D \hat{\lambda}_- = mL/|\hat{p}|, \quad (2.27)$$

donde $\widehat{\lambda}_{\pm}$ son los proyectores sobre subespacios con momentos positivos o negativos, que no conmutan con \widehat{T}_D . La última igualdad en la Ec. (2.27), específica del movimiento libre, es particularmente transparente y reproduce una de las expresiones del TDP clásico. Los autoestados son $|\pm k\rangle$, $k > 0$, y los correspondientes autovalores son dos veces degenerados e iguales al tiempo clásico, $mL/\hbar|k|$. La distribución de TDP para este operador es, para estados con momento positivo,

$$\pi_{\psi}(\tau) = \frac{mL}{\hbar\tau^2} \left| \widetilde{\psi} \left(\frac{mL}{\hbar\tau} \right) \right|^2, \quad (2.28)$$

que coincide con la distribución clásica para funciones de onda limitadas a momentos positivos. De esta manera vemos que la distribución (2.12) presenta términos de interferencia incluso si sólo existen momentos positivos. Concretamente, para un estado ψ con momentos solamente positivos, el segundo momento del operador TDP toma la forma

$$\begin{aligned} \langle \widehat{T}_D^2 \rangle &= \int_0^{\infty} dk (\mathbb{T}^2)_{kk} |\widetilde{\psi}(k)|^2 = \int_0^{\infty} dk (|\mathbb{T}_{kk}|^2 + |\mathbb{T}_{k-k}|^2) |\widetilde{\psi}(k)|^2 \\ &= \int_0^{\infty} dk \frac{m^2 L^2}{k^2 \hbar^2} \left[1 + \frac{1}{k^2 L^2} \sin^2(kL) \right] |\widetilde{\psi}(k)|^2, \end{aligned} \quad (2.29)$$

que contrasta con la expresión clásica

$$\langle \widehat{t}_D^2 \rangle = \int_0^{\infty} dk \frac{m^2 L^2}{k^2 \hbar^2} |\widetilde{\psi}(k)|^2 \quad (2.30)$$

e indica que, en efecto, el segundo término se debe a la interferencia cuántica.

Si consideramos un paquete de ondas altamente monocromático, la distribución clásica debería estar muy concentrada en torno a mL/p_0 , donde p_0 es el momento central de la función de onda, $p_0 = k_0 \hbar$; por otro lado, la distribución cuántica consiste en dos picos agudos, centrados en $t_+(k_0)$ y $t_-(k_0)$ respectivamente. La distancia entre picos va hacia cero cuando p_0 aumenta, como era de esperar en el límite clásico.

Merece la pena también examinar la versión en-la-capa-de-energía de \widehat{t}_D , \mathbf{t} . Factorizando la función delta de la energía como en la Ec. (2.5) obtenemos para una onda plana $|k\rangle$ el valor medio $\mathbf{t}_{kk} = mL/(\hbar k)$, igual a \mathbb{T}_{kk} , pero el segundo momento difiere, $(\mathbf{t}^2)_{kk} = (\mathbf{t}_{kk})^2 = (\mathbb{T}_{kk})^2 \leq (\mathbb{T}^2)_{kk}$, véase Fig. 1; en otras palabras, la varianza en la capa de energía es cero porque solo existe un autovalor para \mathbf{t} . Esto contrasta con el término extra en la Ec. (2.29) que, de nuevo, subraya el carácter cuántico del operador de TDP, \widehat{T}_D , y sus fluctuaciones cuánticas.

2.4. TDP en una barrera de potencial

Estudiaremos ahora el caso del TDP en una barrera o pozo de potencial sin estados ligados, esto es, el TDP en un intervalo que coincide con la zona donde está localizado el soporte del potencial $V(x)$. Por simplicidad, supondremos como antes que este intervalo comienza en el punto $x = 0$ y tiene una longitud L . Usaremos la base completa de estados estacionarios entrantes, $|k^+\rangle$, y la representación de posiciones. Para $k > 0$,

$$\langle x|k^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} e^{ikx} + R^l(k)e^{-ikx} & \text{para } x < 0 \\ T^l(k)e^{ikx} & \text{para } x > L \end{cases}, \quad (2.31)$$

mientras que, para $k < 0$, tenemos

$$\langle x|k^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} T^r(-k)e^{ikx} & \text{para } x < 0 \\ e^{ikx} + R^r(-k)e^{-ikx} & \text{para } x > L \end{cases} \quad (2.32)$$

(los superíndices l, r en T^l, R^l , y T^r, R^r denotan incidencias por la izquierda y la derecha respectivamente). Hemos omitido cualquier expresión explícita en el intervalo $[0, L]$ debido a ser una zona dependiente del potencial. Los autovalores y autoestados del operador TDP pueden calcularse formalmente usando $\widehat{H}|k^+\rangle = (k^2\hbar^2/2m)|k^+\rangle$. Para ese fin, se define

$$\xi(k) = \frac{\langle k^+|\chi_D(\widehat{x})|k^+\rangle}{2\sigma(k)}, \quad (2.33)$$

donde

$$\sigma(k) = |\langle -k^+|\chi_D(\widehat{x})|k^+\rangle|, \quad (2.34)$$

y

$$e^{i\varphi(k)} = \frac{\langle -k^+|\chi_D(\widehat{x})|k^+\rangle}{\sigma(k)}. \quad (2.35)$$

Adicionalmente, para hacer más compacta la formulación, sea

$$\mu(k) = \frac{1}{2} [\xi(-k) - \xi(k)]. \quad (2.36)$$

Tenemos que los autovalores del operador TDP vienen dados por

$$t_{\pm}(k) = \frac{2\pi m\sigma(k)}{|k|\hbar} \left[\frac{\xi(k) + \xi(-k)}{2} \pm \sqrt{1 + \mu^2(k)} \right], \quad (2.37)$$

mientras que los autoestados son

$$|t_{\pm}(k)\rangle = N_{\pm} \left\{ |k^+\rangle + e^{i\varphi(k)} \left[\mu(k) \pm \sqrt{1 + \mu^2(k)} \right] |-k^+\rangle \right\}, \quad (2.38)$$

y la constante de normalización es

$$N_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[1 + \mu^2 \pm \mu \sqrt{1 + \mu^2(k)} \right]^{-1/2}. \quad (2.39)$$

De hecho, podemos relacionar las cantidades $\xi(k)$, $\sigma(k)$ y $\varphi(k)$ con las amplitudes de dispersión, siempre que el potencial dispersor esté completamente incluido en la región D . Sea $\bar{\chi}_D(x)$ la función complementaria a $\chi_D(x)$. Podemos calcular $\langle k^+ | \bar{\chi}(\hat{x}) | k^+ \rangle$ explícitamente y, usando la unidad y las condiciones que esto impone a las amplitudes de dispersión, llegamos a las siguientes expresiones (donde se omiten los argumentos de las amplitudes de dispersión, todas están evaluados en k , y donde denotamos la derivada con respecto a k como ∂_k ; además \bar{R} y \bar{T} significan “complejo conjugado” de R y T respectivamente):

$$\begin{aligned} \langle k^+ | \chi_D(\hat{x}) | k^+ \rangle &= \frac{L}{2\pi} |T^l|^2 + \frac{i}{2\pi} [R^l \partial_k \bar{R}^l + T^l \partial_k \bar{T}^l] + \frac{i}{4\pi k} [\bar{R}^l - R^l], \\ \langle -k^+ | \chi_D(\hat{x}) | -k^+ \rangle &= \frac{L}{2\pi} [1 + |R^r|^2] + \frac{i}{2\pi} [R^r \partial_k \bar{R}^r + T^r \partial_k \bar{T}^r] \\ &\quad + \frac{i}{4\pi k} [e^{-2ikL} \bar{R}^r - e^{2ikL} R^r], \\ \langle -k^+ | \chi_D(\hat{x}) | k^+ \rangle &= \frac{L}{2\pi} T^l \bar{R}^r + \frac{i}{2\pi} [R^l \partial_k \bar{T}^r + T^l \partial_k \bar{R}^r] + \frac{i}{4\pi k} [\bar{T}^r - e^{2ikL} T^l]. \end{aligned}$$

El segundo termino de cada una de las expresiones anteriores se pueden identificar con los correspondientes elementos en-la-cap-a-de-energía de la matriz $-(im/k\hbar)S^\dagger \partial_k S$, que es el tiempo de retardo de Smith [101].

2.4.1. La barrera rectangular de potencial

Para el caso concreto de una barrera rectangular de potencial, en el que $V(x) = V_0[\theta(x-L) - \theta(x)]$, donde $\theta(x)$ es la función escalón de Heaviside, podemos utilizar las simetrías del Hamiltoniano $x \rightarrow L-x$ y $k \rightarrow -k$. Esto se refleja en los estados de colisión como sigue,

$$\langle L-x | k^+ \rangle = e^{ikL} \langle x | -k^+ \rangle,$$

de donde $\xi(k) = \xi(-k)$, y $\mu(k) = 0$. Además,

$$\langle k^+ | \chi_D(\hat{x}) | k^+ \rangle = \frac{L |T(k)|^2}{2\pi \kappa^2} \left\{ k^2 - \frac{mV_0}{\hbar^2} \left[1 + \frac{1}{2\kappa L} \sin(2\kappa L) \right] \right\}, \quad (2.40)$$

donde $\kappa = \sqrt{k^2 - 2mV_0/\hbar^2}$ es real y positivo para $k^2 > 2mV_0/\hbar^2$, y con una componente imaginaria positiva para momentos que “tuneleen”, tales que

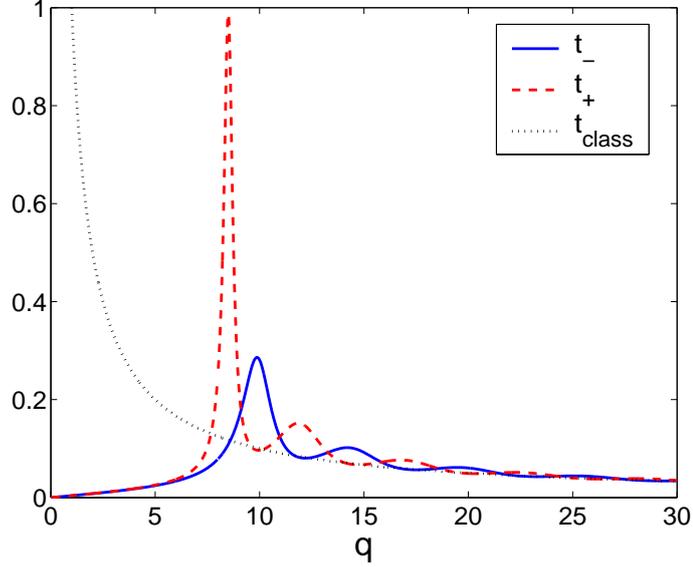


Figura 2.3: Autovalores del TDP para una barrera de potencial cuadrada, en unidades mL^2/\hbar , para $Q = 8$.

$k^2 < 2mV_0/\hbar^2$. Después de un poco de álgebra, se obtiene

$$t_{\pm}(k) = \frac{|T(k)|^2 mL}{2\hbar |k| \kappa^2} [k^2 + \kappa^2 \pm (\kappa^2 - k^2) \cos \kappa L] \left[1 \pm \frac{1}{kL} \sin kL \right], \quad (2.41)$$

que podemos comparar con (2.16); el resultado de la partícula libre se modula por la amplitud de transmisión y un factor oscilante que depende del potencial. Para energías altas el término de modulación tiende a uno, y se recupera el caso de la partícula libre, como debe ser. Para momentos pequeños, ambos autovalores tienden a cero con el momento, al contrario del caso de la partícula libre, donde uno de ellos diverge. También es relevante el hecho que los autovalores del TDP están acotados, y por lo tanto el valor medio también lo está. Es conveniente expresar los autovalores en forma adimensional ($k = q/L$, $V_0 = \hbar^2 Q^2/(2mL^2)$):

$$t_{\pm}(k) = \frac{2mL^2}{\hbar} \frac{q \pm \frac{q}{\sqrt{q^2 - Q^2}} \sin \sqrt{q^2 - Q^2}}{2q^2 - Q^2 \pm Q^2 \cos \sqrt{q^2 - Q^2}}, \quad (2.42)$$

véase la Fig. 2.3.

2.4.2. TDP promedio a partir de medidas de la fluorescencia

En este apartado modelizaremos la medición del promedio del TDP $\tau_D = \langle \widehat{T}_D \rangle$ de un átomo ultra-frío dentro de una barrera cuadrada creada por un láser perpendicular a su movimiento, con intensidad homogénea entre 0 y L .

El átomo puede aproximarse como un sistema de dos niveles que se acoplan en una región del espacio a un láser alejado de la frecuencia de resonancia, con gran desintonizado, $\Delta \gg \gamma, \Omega$, donde Δ se define como la frecuencia del láser menos la frecuencia de la transición atómica, γ es la constante de decaimiento (el inverso del tiempo de vida o coeficiente de Einstein) y Ω es la frecuencia de Rabi.

La amplitud del proceso de emisión y detección del primer fotón de un átomo en su estado fundamental viene gobernada por el siguiente potencial efectivo [65, 82]

$$V(x) = V_R - iV_I = \frac{\hbar\Omega^2}{4\Delta} - i\frac{\hbar\gamma\Omega^2}{8\Delta^2}, \quad (2.43)$$

tal que la detección del retraso (tiempo de vida del estado fundamental si el átomo en reposo se coloca en la región iluminada por el láser) es $4\Delta^2/\Omega^2\gamma$ [74], donde γ es fija para la transición atómica, Ω y Δ pueden ser controlados experimentalmente, y la relación Ω^2/Δ se puede elegir siempre tal que la parte real de V permanezca constante. Esto deja algo de libertad para fijar el valor que deseamos en la parte imaginaria. Si nos aseguramos de que se emite un fotón fluorescente por átomo, esto es, $\tau_D \gg 4\Delta^2/\Omega^2\gamma$, la señal de fluorescencia producida por un grupo de átomos será proporcional a la probabilidad de absorción A , y esta señal proporciona, después de la calibración para tener en cuenta el ángulo sólido y la eficiencia del detector, una aproximación para la derivada (2.45) y por lo tanto, el promedio del TDP para el potencial (2.43) como

$$\tau_D \approx \hbar A / (2V_I). \quad (2.44)$$

Este resultado se obtiene integrando $-dN/dt = (2V_I/\hbar)\langle\psi(t)|\chi_D(\widehat{x})|\psi(t)\rangle$ sobre el tiempo, N es la norma de átomos no detectados, y $A = 1 - N$ la absorción (fracción de átomos detectados). En el límite $V_I \rightarrow 0$ y para incidencia casi monocromática, se obtiene el TDP medio (estacionario) en un potencial real,

$$\mathbb{T}_{kk} = \lim_{V_I \rightarrow 0} (\hbar/2)\partial_{V_I} A(k), \quad (2.45)$$

donde $A(k)$ es la probabilidad total de absorción para número de onda incidente k . Puede verificarse sin dificultad la equivalencia de esta cantidad con $(t_+(k) + t_-(k))/2$.

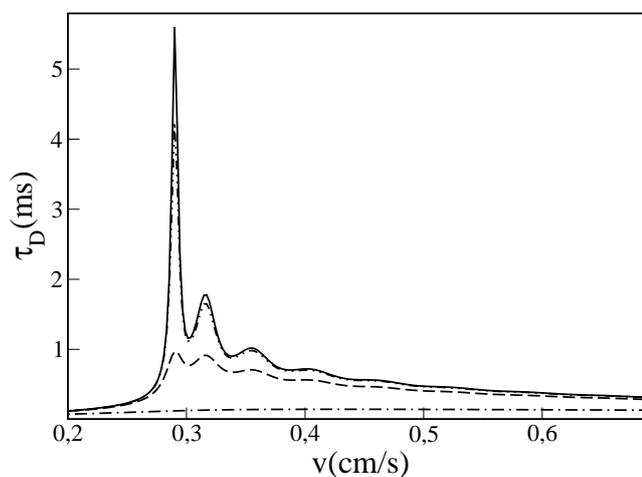


Figura 2.4: Valor exacto del TDP (línea continua) para átomos de Cs que cruzan una barrera cuadrada de $2\mu\text{m}$ de ancho y altura $8,2674 \times 10^3 s^{-1}\hbar$ (en unidades de velocidad, $0,28 \text{ cm/s}$) frente a la velocidad incidente. Las aproximaciones están calculadas con la Ec. (2.44) para $V_I = 3,307 s^{-1}\hbar = V_1$ (indistinguible del resultado exacto, $\Delta = 2500\gamma$, $\Omega = 1,57\gamma$), $10 V_1$ (línea doble punto-trazo, $\Delta = 250\gamma$, $\Omega = 0,5\gamma$), $10^2 V_1$ (línea de trazos, $\Delta = 25\gamma$, $\Omega = 0,16\gamma$), y $10^3 V_1$ (línea de trazos y puntos, $\Delta = 2,5\gamma$, $\Omega = 0,05\gamma$). La transición es a 852 nm con $\gamma=33.3 \times 10^6 s^{-1}$; Δ y Ω se obtienen de la Ec. (2.43).

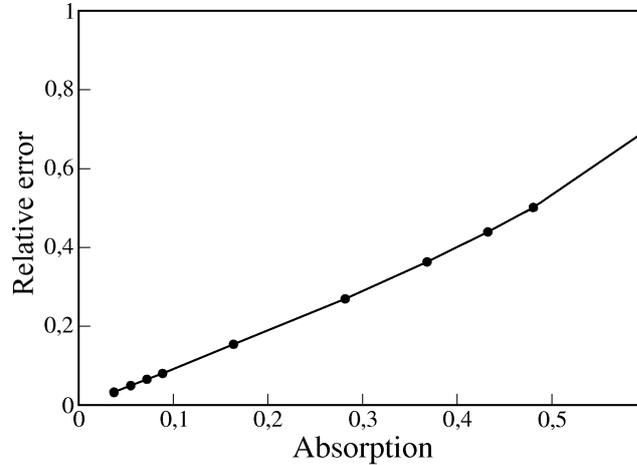


Figura 2.5: Errores relativos calculados entre los resultados máximo y aproximado, $|\tau_D(\text{exact}) - \tau_D(\text{approx})|/\tau_D(\text{exact})$, contra la probabilidad de absorción (detección) usada para calcular $\tau_D(\text{approx})$ en el máximo. El sistema es el mismo que en la figura anterior.

Se podría pensar en relajar la condición de un fotón como máximo por átomo. Para V_R despreciable respecto a E , se podría esperar que para algunos regímenes la distribución de fotones emitidos fuera también bimodal. Para observar la bimodalidad, el intervalo característico entre modos (\hbar/E , donde E es la energía de la partícula) debería ser más grande que el intervalo característico entre emisiones sucesivas de fotones fluorescentes, pero estas condiciones y $\Delta > \gamma$ no son compatibles, y similares dificultades aparecen si el láser excita al átomo en resonancia. Una tarea pendiente es la aplicación de técnicas experimentadas ya con éxito a los tiempos de llegada, por lo menos en teoría (deconvolución o normalización de operadores).

La figura 2.4 muestra el TDP exacto y una aproximación para diferentes valores de V_I para una transición de átomos de Cs (los detalles están en la figura). Un V_I grande implica grandes errores pero también una señal más fuerte. En la práctica, la señal mínima requerida determina la precisión con la que se puede medir el TDP. La figura 2.5 muestra el error relativo del máximo del TDP frente a la correspondiente probabilidad de absorción. En esta figura el haz es monocromático. Se puede comprobar la predicción cuántica, contraria al caso clásico, de que el valor del TDP cuántico está acotado para todas las energías.

Capítulo 3

Relación entre el TDP cuántico y las funciones de correlación flujo-flujo

*La mecánica cuántica permitiría
hacer la declaración de la renta
en un segundo*

J. Ignacio Cirac

En este capítulo se generalizará un estudio anterior de Pollak y Miller [E. Pollak and W. H. Miller, Phys. Rev. Lett. **53**, 115 (1984)][90], quienes demostraron que el promedio del TDP estacionario coincide con el primer momento dado por una función de correlación flujo-flujo (FCFF) microcanónica. Demostraremos que esta relación también es válida para el segundo momento (que muestra un carácter cuántico), y extenderemos el análisis al caso de paquetes de ondas dependientes del tiempo. Sin embargo la relación falla para el tercer momento y momentos de orden superior por lo que la FCFF solo contiene parte de la información de la distribución del TDP, aunque ciertamente, es la parte más importante. También discutiremos un posible esquema para medir las FCFF, creando un camino para acceder experimentalmente a las características cuánticas de la distribución del Tiempo de Permanencia.

3.1. Funciones de correlación flujo-flujo estacionarias

Pollak y Miller establecieron la primera conexión entre el TDP promedio estacionario y el primer momento de una distribución de correlación flujo-flujo FCFF [90]. Ellos definen una FCFF microcanónica cuántica $C_{PM}(\tau, k) = \text{Tr}\{\text{Re } \widehat{C}_{PM}(\tau, k)\}$ mediante el operador

$$\begin{aligned} \widehat{C}_{PM}(\tau, k) &= 2\pi\hbar[\widehat{J}(x_2, \tau)\widehat{J}(x_1, 0) + \widehat{J}(x_1, \tau)\widehat{J}(x_2, 0) \\ &\quad - \widehat{J}(x_1, \tau)\widehat{J}(x_1, 0) - \widehat{J}(x_2, \tau)\widehat{J}(x_2, 0)]\delta(E_k - \widehat{H}), \end{aligned} \quad (3.1)$$

donde $\widehat{J}(x, t) = e^{i\widehat{H}t/\hbar} \frac{1}{2m} [\widehat{p}\delta(\widehat{x} - x) + \delta(\widehat{x} - x)\widehat{p}] e^{-i\widehat{H}t/\hbar}$ es el operador de flujo cuántico en la representación de Heisenberg, y \widehat{p} and \widehat{x} son los operadores de momento y posición.

Esta definición proviene de la mecánica clásica y se puede entender de una manera intuitiva: la Ec. (3.1) suma las correlaciones de flujo de partículas que entran a \mathcal{R} por x_1 (x_2) y salen por x_2 (x_1) un tiempo τ más tarde. Además, las partículas pueden ser reflejadas y abandonar la región \mathcal{R} por el mismo punto que han entrado. Esto se describe en los dos últimos términos, donde el signo menos compensa el cambio de signo del flujo. Hay que observar que estos términos negativos conducen a una contribución de auto-correlación que hace que la distribución $\widehat{C}_{PM}(\tau, k)$ diverja cuando $\tau \rightarrow 0$.

A continuación repasaremos la conexión entre la FCFF y el TDP promedio y después llegaremos a una relación similar para el segundo momento. En el resto del capítulo solo consideraremos momentos incidentes positivos, por lo que vamos a sustituir $\widehat{C}_{PM}(\tau, k)$ por \widehat{C}_{PM}^+ , y $\delta(E_k - \widehat{H})$ por $\delta^+(E_k - \widehat{H}) := \delta(E_k - \widehat{H})\Lambda_+$, donde Λ_+ es el proyector sobre el subespacio de autoestados de H con momentos incidentes positivos. Observemos para empezar que, por la ecuación de continuidad,

$$-\frac{d}{dx} \widehat{J}(x, t) = \frac{d}{dt} \widehat{\rho}(x, t), \quad (3.2)$$

donde $\widehat{\rho}(x, t) = e^{i\widehat{H}t/\hbar} \delta(\widehat{x} - x) e^{-i\widehat{H}t/\hbar}$ es el operador de densidad en la representación de Heisenberg, $\widehat{C}_{PM}^+(\tau, k)$ se puede escribir como¹

$$\widehat{C}_{PM}^+(\tau, k) = -2\pi\hbar \left(\frac{d}{d\tau} \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(\tau) \right) \left(\frac{d}{dt} \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(t) \right)_{t=0} \delta^+(E_k - \widehat{H}), \quad (3.3)$$

¹Véase su obtención en el Apéndice Matemático.

donde $\widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(t)$ es el proyector, en la representación de Heisenberg, sobre la región del espacio elegida,

$$\widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(t) = e^{i\widehat{H}t/\hbar} \int_{x_1}^{x_2} dx |x\rangle \langle x| e^{-i\widehat{H}t/\hbar}.$$

Integrando por partes y usando la ecuación del movimiento de Heisenberg, el primer momento de la función de correlación de Pollak-Miller está dado por

$$\text{Tr} \left\{ \int_0^\infty d\tau \tau \widehat{C}_{PM}^+(\tau, k) \right\} = \text{Tr} \left\{ 2\pi\hbar \int_0^\infty d\tau \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(\tau) \frac{1}{i\hbar} [\widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(0), \widehat{H}] \delta^+(E_k - \widehat{H}) \right\}. \quad (3.4)$$

Los términos de frontera de la forma $\lim_{\tau \rightarrow \infty} \tau^\gamma \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(\tau)$, $\gamma = 0, 1, 2$, se omiten de aquí en adelante. Esto se justifica recordando que los estados físicos deben ser dependientes del tiempo y de cuadrado integrable por lo que la contribución de dichos términos se anula cuando se realiza una integración sobre funciones de onda estacionarias (en la siguiente sección discutiremos en detalle una versión de la función de correlación dependiente del tiempo). Con potenciales de colisión la densidad de probabilidad generalmente disminuye como τ^{-3} , lo cual asegura un valor finito del TDP, pero para el movimiento libre decae como τ^{-1} [73], lo que hace τ_D infinito, a no ser que la función de onda en momentos se anule con suficiente rapidez cuando k tiende a cero [24].

Si se escribe explícitamente el conmutador, y se usan las propiedades cíclicas de la traza de una matriz tenemos

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \left\{ \int_0^\infty d\tau \tau \widehat{C}_{PM}^+(\tau, k) \right\} \\ &= \text{Tr} \left\{ 2\pi\hbar \int_0^\infty d\tau \left(-\frac{d}{d\tau} \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(\tau) \right) \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(0) \delta^+(E_k - \widehat{H}) \right\}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

e integrando sobre τ recuperamos el resultado obtenido por Pollak y Miller,

$$\text{Tr} \left\{ \int_0^\infty d\tau \tau \widehat{C}_{PM}^+(\tau, k) \right\} = 2\pi\hbar \text{Tr} \left\{ \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(0) \delta^+(E_k - \widehat{H}) \right\} = \mathbb{T}_{kk}. \quad (3.6)$$

Expresando la traza en la base $|\phi_k\rangle$ volvemos a tener el TDP estacionario de la Ec. (2.7), es decir, el elemento diagonal del operador del TDP en la capa de energía, \mathbb{T}_{kk} .

El cálculo del valor medio en [90] es diferente en algunos aspectos: (a) Las coordenadas x_1 y x_2 se toman en menos y más infinito, pero se pueden llevar a valores finitos modificando la Ec. (8) de [90] convenientemente; (b) Formalmente no hay términos frontera en el infinito pero se requiere una

regularización en la Ec. (16) de [90], que se justifica para paquetes de onda; (c) $\delta(E_k - \widehat{H})$ se usa en lugar de $\delta^+(E_k - \widehat{H})$: esto simplemente proporciona una contribución adicional para momentos negativos paralela a la que se ha obtenido aquí para momentos positivos; (d) En nuestra derivación del tiempo medio se obtiene directamente como una cantidad real, a pesar de que $\widehat{C}_{PM}^+(\tau, k)$ no es autoadjunto, mientras que en [90] se toma la parte real. (La discusión del tiempo medio imaginario en [90] se basa en una versión modificada de la Ec. (3.1).)

A continuación, vamos a demostrar que el segundo momento de la FCFF de Pollak-Miller es igual al segundo momento de \mathbb{T} . Esto se pasó por alto en la Ref. [90]. Procediendo como antes,²

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left\{ \text{Re} \int_0^\infty d\tau \tau^2 \widehat{C}_{PM}^+(\tau, k) \right\} &= \frac{4\pi^2 m^2}{\hbar^2 k^2} \left[\left(\int_{x_1}^{x_2} dx |\phi_k(x)|^2 \right)^2 \right. \\ &+ \left. \left| \int_{x_1}^{x_2} dx \phi_k^*(x) \phi_{-k}(x) \right|^2 \right] = (\mathbb{T}^2)_{kk}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Se muestra así que la relación entre el TDP y las funciones de correlación flujo-flujo va más allá de los valores medio y que $C_{PM}^+(\tau, k)$ incluye las características cuánticas del TDP: el primer sumando del corchete en la Ec. (3.7), no es más que $(\mathbb{T}_{kk})^2$, mientras que el segundo sumando es positivo, lo cual permite que la varianza en-la-capade-energía no sea cero sino $(\mathbb{T}^2)_{kk} - (\mathbb{T}_{kk})^2$. Es importante observar que, a pesar de que el estado estacionario que se ha considerado solo tiene momentos positivos, $\phi_k(x)$, $k > 0$, este segundo término implica también a la otra componente degenerada $\phi_{-k}(x)$, y generalmente no es cero.

Surge la cuestión de si estas conexiones se generalizan a otros momentos de $C_{PM}^+(\tau, k)$. La respuesta es no, como veremos en la siguiente sección con más detalle.

3.2. Funciones de correlación flujo-flujo dependientes del tiempo

A continuación se presenta una versión dependiente del tiempo de la función de correlación flujo-flujo anterior y su relación con el tiempo de permanencia. Hasta ahora, la FCFF ha sido utilizada habitualmente en química física para definir velocidades de reacción en colectivos canónicos o micro-

²Véase su obtención en el Apéndice Matemático.

canónicos [66]. No obstante, se puede definir físicamente una versión dependiente del tiempo mediante el operador

$$\begin{aligned} \widehat{C}(\tau) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt [\widehat{J}(x_2, t + \tau)\widehat{J}(x_1, t) + \widehat{J}(x_1, t + \tau)\widehat{J}(x_2, t) \\ &\quad - \widehat{J}(x_1, t + \tau)\widehat{J}(x_1, t) - \widehat{J}(x_2, t + \tau)\widehat{J}(x_2, t)], \end{aligned} \quad (3.8)$$

que conduce a la función de correlación flujo-flujo

$$C(\tau) = \langle \text{Re } \widehat{C}(\tau) \rangle_{\psi}, \quad (3.9)$$

donde la parte real se toma para simetrizar, como antes, el operador no autoadjunto $\widehat{C}(\tau)$.

Como en el caso estacionario, la Ec. (3.9) suma correlaciones flujo-flujo para entradas en \mathcal{R} a través de x_1 ó x_2 a tiempo t y salidas por x_1 ó x_2 en un tiempo τ posterior. Además, se debe integrar sobre el tiempo de entrada t . Es fácil demostrar que el primer momento de la versión clásica de la Ec. (3.8), donde \widehat{J} se reemplaza por la variable clásica del flujo, nos proporciona el valor medio del TDP clásico.

Como en la Ec. (3.3), podemos poner $\widehat{C}(\tau)$ en la forma

$$\widehat{C}(\tau) = - \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{d}{d\tau} \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(\widehat{x}, t + \tau) \frac{d}{dt} \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(\widehat{x}, t). \quad (3.10)$$

Lo primero que vemos es que la FCFE $C(\tau)$ no es normalizable, de hecho las contribuciones negativas cancelan exactamente a las positivas,³

$$\int_0^{\infty} d\tau \widehat{C}(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(t) \frac{d}{dt} \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(t) = 0. \quad (3.11)$$

A continuación se deriva el valor medio con una función de correlación dependiente del tiempo. Con una integración por partes tenemos

$$\int_0^{\infty} d\tau \tau \widehat{C}(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_0^{\infty} d\tau \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(\widehat{x}, t + \tau) \frac{d}{dt} \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(\widehat{x}, t).$$

Una segunda integración por partes con respecto a t , reemplazando d/dt por $d/d\tau$ e integrando sobre τ nos da

$$\int_0^{\infty} d\tau \tau \widehat{C}(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}^2(\widehat{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(\widehat{x}, t) = \widehat{T}_D, \quad (3.12)$$

³Véase su obtención en el Apéndice Matemático.

donde se han usado las propiedades de $\widehat{\chi}_{\mathcal{R}}$. La Ec. (3.12) generaliza el resultado de Pollak y Miller al TDP dependiente del tiempo.

Puede efectuarse un cálculo similar para el segundo momento de $C(\tau)$. Después de tres integraciones por partes y teniendo en cuenta que para libramos del factor τ^2 las contribuciones en la frontera se anulan, obtenemos

$$\int_0^{\infty} d\tau \tau^2 \widehat{C}(\tau) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_0^{\infty} d\tau \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(\widehat{x}, t + \tau) \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(\widehat{x}, t).$$

Evaluamos la parte real de esta expresión. Haciendo las sustituciones $t + \tau \rightarrow t$ y $\tau \rightarrow -\tau$ en el término complejo conjugado, se tiene

$$\text{Re} \int_0^{\infty} d\tau \tau^2 \widehat{C}(\tau) = \widehat{T}_D^2. \quad (3.13)$$

3.3. El movimiento libre

Como ejemplo de la relación entre el TDP y la FCFF, en esta sección estudiaremos el movimiento libre. Para un flujo estacionario de partículas con energía E_k , $k > 0$, descrito por $\phi_k(x) = \langle x|k \rangle = (2\pi)^{-1/2} e^{ikx}$, los tres primeros momentos en la capa de energía para una distribución ideal del TDP son⁴

$$\mathbb{T}_{kk} = \frac{mL}{\hbar k}, \quad (3.14)$$

$$(\mathbb{T}^2)_{kk} = \frac{m^2 L^2}{\hbar^2 k^2} \left(1 + \frac{\sin^2(kL)}{k^2 L^2} \right), \quad (3.15)$$

$$(\mathbb{T}^3)_{kk} = \frac{m^3 L^3}{\hbar^3 k^3} \left(1 + 3 \frac{\sin^2(kL)}{k^2 L^2} \right). \quad (3.16)$$

Como hemos probado antes, los dos primeros momentos coinciden con los momentos correspondientes de la FCFF de Pollak-Miller, pero para el tercer momento tenemos que

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \left\{ \text{Re} \int_0^{\infty} d\tau \tau^3 \widehat{C}_{PM}^+(\tau, k) \right\} \\ &= \frac{m^3 L^3}{\hbar^3 k^3} \left[1 - \frac{3[1 + \cos^2(kL)]}{k^2 L^2} + \frac{3 \sin(2kL)}{L^3 k^3} \right]. \end{aligned} \quad (3.17)$$

En la Fig. 3.1 se comparan los primeros tres momentos. La coincidencia entre $(\mathbb{T}^3)_{kk}$ y Ec. (3.17) es muy buena para valores grandes de k , pero son claramente diferentes para k pequeños.

⁴Véase su obtención en el Apéndice Matemático.

A pesar de esto, la coincidencia de los dos primeros momentos sugiere un comportamiento similar de $\Pi(\tau)$ y $C(\tau)$. Para calcular $\Pi(\tau)$ con una función de onda $\tilde{\psi}(k) := \langle k|\psi\rangle$ con momentos con componentes solo positivos, se usa la representación en k teniendo en cuenta la bimodalidad del TDP, $t_{\pm}(k) = mL[1 \pm \sin(kL)/kL]/\hbar k$,⁵

$$\Pi(\tau) = \frac{1}{2} \sum_j \sum_{\gamma=\pm} \frac{|\tilde{\psi}(k_j^{\gamma}(\tau))|^2}{|F'_{\gamma}(k_j^{\gamma}(\tau))|}, \quad (3.18)$$

donde el sumatorio en j es sobre las soluciones $k_j^{\gamma}(\tau)$ de la ecuación $F_{\gamma}(k) \equiv t_{\gamma}(k) - \tau = 0$ y la derivada es respecto a k . En particular, usaremos para los cálculos [70] una función de onda que se anula cuando $k < 0$,

$$\tilde{\psi}(k) = N(1 - e^{-\alpha k^2}) e^{-(k-k_0)^2/[4(\Delta k)^2]} e^{-ikx_0} \Theta(k), \quad (3.19)$$

donde N es la constante de normalización y $\Theta(k)$ es la función escalón. Para la función de correlación flujo-flujo escribimos

$$C(\tau) = \text{Re} \int_0^{\infty} dk \int_0^{\infty} dk' \tilde{\psi}^*(k) \tilde{\psi}(k') \langle k|\widehat{C}(\tau)|k'\rangle, \quad (3.20)$$

y $C_{kk'}(\tau) = \langle k|\widehat{C}(\tau)|k'\rangle$ para el caso libre esta dado por

$$\begin{aligned} C_{kk'}(\tau) &= \frac{m}{2\pi\hbar k} \delta(k - k') \frac{d^2}{d\tau^2} \left[2f(\hbar k\tau/m) \right. \\ &\quad \left. - f(\hbar k\tau/m - L) - f(\hbar k\tau/m + L) \right], \end{aligned} \quad (3.21)$$

donde

$$f(x) = -2e^{imx^2/(2\hbar\tau)} \left(\frac{i\pi\hbar\tau}{2m} \right)^{1/2} + i\pi x \text{erfi} \left(\sqrt{\frac{im}{2\hbar\tau}} x \right). \quad (3.22)$$

El resultado se muestra en la Fig. 3.2. La FCFF presenta una joroba alrededor del TDP esperado (el área bajo esta joroba es prácticamente igual a uno), pero su comportamiento es fuertemente oscilante para τ pequeños y diverge para $\tau \rightarrow 0$. Como discutimos anteriormente, esto se debe a la contribución de auto-correlación de paquetes de onda que están en x_1 ó x_2 en los tiempos t y $t + \tau$ *sin* cambiar la dirección del movimiento. Una característica similar se ha observado en una distribución del tiempo de paso deducida a través de integrales de caminos [28].

⁵Los autoestados correspondientes son $|t_{\pm}(k)\rangle = (|k\rangle \pm \exp[ik(x_1 + x_2)]| - k\rangle)/\sqrt{2}$.

Por el contrario, $\Pi(\tau)$ se comporta regularmente para $\tau \rightarrow 0$, pero muestra una serie de picos en la región de la joroba. Esto se debe a que el denominador de la Ec. (3.18) se hace cero si la pendiente de los autovalores $t_{\pm}(k)$ es cero, cosa que ocurre en todos los puntos de cruce entre $t_{+}(k)$ y $t_{-}(k)$, véase la Fig. 3.3.

Se puede definir otra distribución del TDP para el movimiento libre basándose en el operador $\hat{t}_D = mL/|\hat{p}|$, que se ha obtenido a partir de la cuantización del TDP clásico. Las autofunciones de este operador son las autofunciones del momento, $|\pm k\rangle$, $k > 0$, y los autovalores correspondientes son dos veces degenerados e iguales al tiempo clásico, $mL/\hbar|k|$. La distribución del TDP para este operador, para estados con momentos positivos, viene dada por

$$\pi(\tau) = \frac{mL}{\hbar\tau^2} \left| \tilde{\psi} \left(\frac{mL}{\hbar\tau} \right) \right|^2. \quad (3.23)$$

La distribución $\pi(\tau)$ coincide con $C(\tau)$ en la región cercana al valor medio del TDP y tiende a cero para $\tau \rightarrow 0$. A pesar de ello, no muestra los picos de resonancia de $\Pi(\tau)$. También es interesante examinar la versión de \hat{t}_D en-la-capa-de-energía, \mathbf{t} . Factorizando la función delta de energía como en la Ec. (2.5) tenemos para una onda plana $|k\rangle$ el valor medio $\mathbf{t}_{kk} = mL/(\hbar k)$, que es igual a \mathbf{T}_{kk} , pero el segundo momento difiere, $(\mathbf{t}^2)_{kk} = (\mathbf{t}_{kk})^2 = (\mathbf{T}_{kk})^2 \leq (\mathbf{T}^2)_{kk}$, véase la Fig. 3.1; en otras palabras, la varianza en la capa de energía es cero porque solo hay un autovalor posible para \mathbf{t} . Esto contrasta con el término extra de la Ec. (3.15), que vuelve a hacer énfasis en el carácter no-clásico del operador TDP, \hat{T}_D , y su fluctuación cuántica.

¿Podrían ser ambos operadores, \hat{T}_D y \hat{t}_D , físicamente significativos? En ausencia de medidas directas del TDP, esto depende de su relación con otros observables. Los resultados aquí obtenidos indican que el segundo momento de la función de correlación de flujo-flujo se relaciona con el primer operador y no con el segundo, y esto proporciona apoyo indirecto a la relevancia física de los picos de resonancia del TDP, pero otros observables se podrían comportar de forma diferente.

3.4. Discusión

Hemos demostrado que la relación que encontraron Pollak y Miller [90] entre el primer momento de la distribución FCFF y el valor medio del TDP estacionario también vale para el segundo momento y para correlaciones flujo-flujo de paquetes de onda. Por otro lado, esta relación no vale para el tercer momento. En cuanto a la posibilidad de hallar experimentalmente la varianza

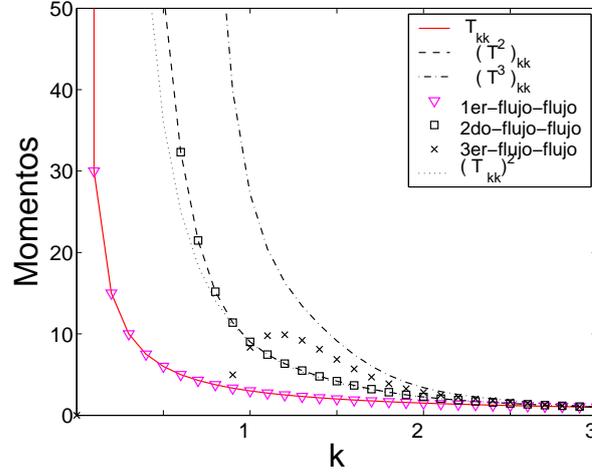


Figura 3.1: Comparación de los primeros tres momentos: T_{kk} , $(T^2)_{kk}$ y $(T^3)_{kk}$ con los correspondientes momentos de la función de correlación flujo-flujo, para un estado estacionario con movimiento libre. También se representa $(T_{kk})^2$ (línea de puntos). $\hbar = m = 1$ y $L = 3$.

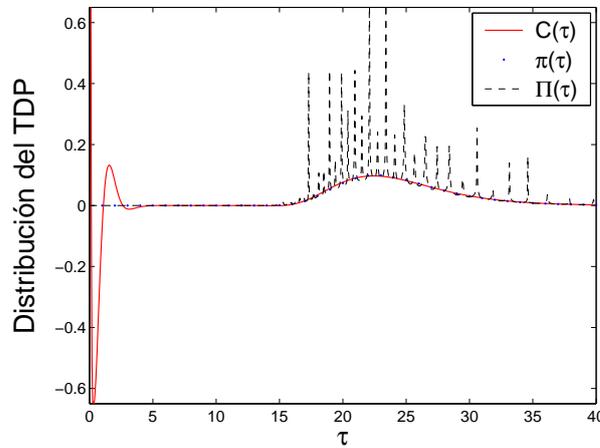


Figura 3.2: Comparación de la distribución del TDP $\Pi(\tau)$ (línea discontinua) y la función de correlación de flujo-flujo $C(\tau)$ (línea continua) para un paquete de ondas con movimiento libre (3.19). Además, se representa la distribución del TDP alternativa para el movimiento libre $\pi(\tau)$, Eq. (3.23), (círculos). Se ha usado $\hbar = m = 1$ y $|x_0|$ suficientemente grande para evitar el solapamiento del estado inicial con la región del espacio $\mathcal{R} = [0, 45]$. $k_0 = 2$, $\Delta k = 0,4$, y $\alpha = 0,5$.

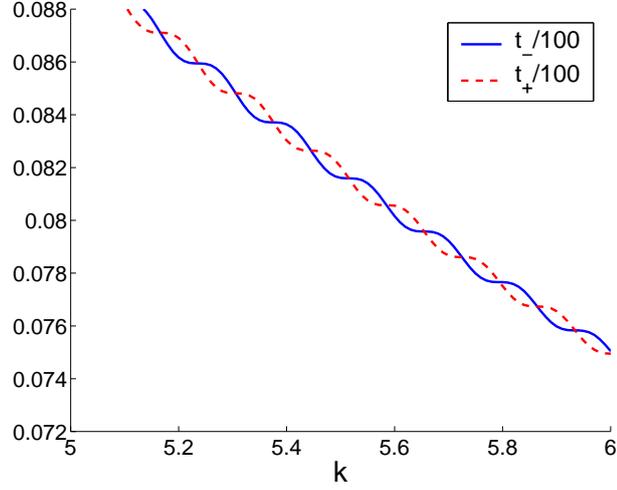


Figura 3.3: Autovalores $t_{\pm}(k)$. Se observa que, periódicamente, los valores de $t_{-}(k)$ y $t_{+}(k)$ coinciden. Se han utilizado los mismos parámetros que en la figura anterior.

del TDP, la dificultad se traslada a la realización de medidas con la FCFF, que no es necesariamente una tarea fácil. La aproximación más simple es sustituir en $C(\tau)$, el valor esperado del producto de dos operadores del flujo por el producto de sus valores esperados (el producto de las densidades de corriente). Utilizando el paquete de ondas de la Ec. (3.19), se compara el segundo momento calculado con la expresión completa (3.9), $\langle \hat{T}_D^2 \rangle_C$, con esta aproximación, $\langle \hat{T}_D^2 \rangle_{C_0}$, en la Fig. 3.4. Los dos resultados se aproximan cuando $\Delta_k \rightarrow 0$. Otros factores que hacen que la aproximación anterior mejore son el incremento de L y/o de k_0 .

Nos podemos aproximar al resultado exacto sistemáticamente haciendo uso de densidades de corriente ordinarias: Primero descomponemos la función de correlación $\hat{J}(x_i, t + \tau)\hat{J}(x_j, t)$ mediante la resolución de la identidad

$$\hat{1} = \hat{P} + \hat{Q}, \quad (3.24)$$

$$\hat{P} = |\psi\rangle\langle\psi|, \quad (3.25)$$

tal que

$$\hat{J}(x_i, t + \tau)\hat{J}(x_j, t) = \hat{J}(x_i, t + \tau)(|\psi\rangle\langle\psi| + \hat{Q})\hat{J}(x_j, t). \quad (3.26)$$

Es útil descomponer \hat{Q} en términos de una base de estados ortogonal a $|\psi\rangle$, $\{|\psi_j^Q\rangle\}$,

$$\hat{Q} = \sum_j |\psi_j^Q\rangle\langle\psi_j^Q|, \quad (3.27)$$

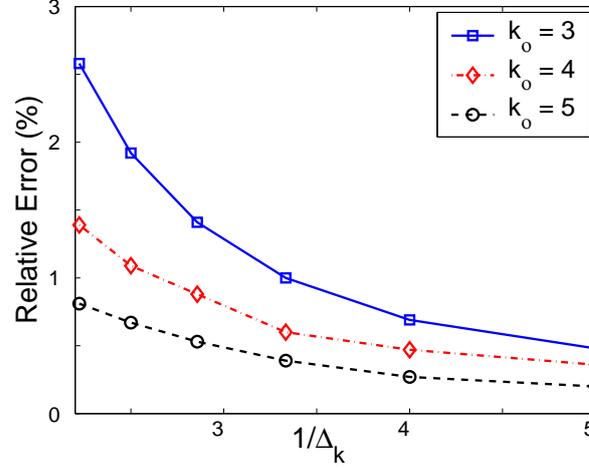


Figura 3.4: Comparación del error relativo para el segundo momento usando la aproximación $C_0(\tau)$ en lugar de $C(\tau)$ para el paquete de ondas con movimiento libre de la Ec. (3.19), $\alpha = 0,5$, $\hbar = m = 1$ y $L = 100$.

que se puede generar sistemáticamente mediante el método de ortogonalización de Gram-Schmidt. Ahora podemos separar la Ec. (3.8),

$$\widehat{C}(\tau) = \widehat{C}_0(\tau) + \widehat{C}_1(\tau), \quad (3.28)$$

donde

$$\begin{aligned} \widehat{C}_0(\tau) = & \int_{-\infty}^{\infty} dt [\widehat{J}(x_2, t + \tau)|\psi\rangle\langle\psi|\widehat{J}(x_1, t) \\ & + \widehat{J}(x_1, t + \tau)|\psi\rangle\langle\psi|\widehat{J}(x_2, t) \\ & - \widehat{J}(x_1, t + \tau)|\psi\rangle\langle\psi|\widehat{J}(x_1, t) \\ & - \widehat{J}(x_2, t + \tau)|\psi\rangle\langle\psi|\widehat{J}(x_2, t)], \end{aligned} \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned} \widehat{C}_1(\tau) = & \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} dt [\widehat{J}(x_2, t + \tau)|\psi_j^Q\rangle\langle\psi_j^Q|\widehat{J}(x_1, t) \\ & + \widehat{J}(x_1, t + \tau)|\psi_j^Q\rangle\langle\psi_j^Q|\widehat{J}(x_2, t) \\ & - \widehat{J}(x_1, t + \tau)|\psi_j^Q\rangle\langle\psi_j^Q|\widehat{J}(x_1, t) \\ & - \widehat{J}(x_2, t + \tau)|\psi_j^Q\rangle\langle\psi_j^Q|\widehat{J}(x_2, t)]. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Similarmente, definimos $C(\tau) = C_0(\tau) + C_1(\tau)$ tomando la parte real de $\langle\psi|\widehat{C}_0(\tau) + \widehat{C}_1(\tau)|\psi\rangle$. C_0 es la aproximación de orden cero que se ha discutido

antes y sólo involucra medidas ordinarias de densidades de corriente [22]. Los términos no diagonales de C_1 , $\langle \psi | \hat{J}(x_i, t) | \psi_j^Q \rangle \langle \psi_j^Q | \hat{J}(x_j, t + \tau) | \psi \rangle$, también se pueden relacionar con flujos ordinarios (elementos diagonales de \hat{J}) mediante los estados auxiliares

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= |\psi\rangle + |\psi_j^Q\rangle, \\ |\psi_2\rangle &= |\psi\rangle + i|\psi_j^Q\rangle, \\ |\psi_3\rangle &= |\psi\rangle - i|\psi_j^Q\rangle, \end{aligned} \tag{3.31}$$

a partir de los que se encuentra que⁶

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{J}(x, t) | \psi_j^Q \rangle &= \frac{1}{2} \langle \psi_1 | \hat{J}(x, t) | \psi_1 \rangle - \frac{1}{4} \langle \psi_2 | \hat{J}(x, t) | \psi_2 \rangle \\ &\quad - \frac{1}{4} \langle \psi_3 | \hat{J}(x, t) | \psi_3 \rangle + \frac{i}{4} \langle \psi_3 | \hat{J}(x, t) | \psi_3 \rangle \\ &\quad - \frac{i}{4} \langle \psi_2 | \hat{J}(x, t) | \psi_2 \rangle. \end{aligned} \tag{3.32}$$

Este procedimiento nos muestra una posible vía para medir el primer y el segundo momento del TDP cuántico, a través de la medida de los valores esperados de las densidades de corriente en diferentes momentos y en diferentes posiciones.

⁶Véase su obtención en el Apéndice Matemático.

Capítulo 4

Limitaciones a bajas velocidades de los relojes atómicos basados en átomos fríos

*Hay quienes estropean relojes
para matar el tiempo.*

Woody Allen

Diversos autores han estudiado cómo afecta el límite de bajas energías a la precisión de los modelos de cronómetros y relojes cuánticos en los que la manecilla del reloj se activa por la presencia de la partícula en una región del espacio, pero aún no se había evaluado su importancia en los relojes atómicos reales. En este capítulo se discuten los efectos cuánticos que se producen en las curvas de resonancia de Rabi y Ramsey, debido al movimiento lento de los átomos. Encontraremos la dependencia del error relativo de la frecuencia de resonancia de los relojes atómicos con la velocidad atómica y los parámetros de interacción del Hamiltoniano.

4.1. Introducción

En una cantidad considerable de trabajos dedicados a los “relojes cuánticos”, la “manecilla” de un reloj va cambiando de posición mientras una partícula atraviesa una región del espacio [7, 95, 88, 13, 57, 58, 89, 10, 59, 1, 20, 2, 104], véase como *review* [96]. La mayor parte de este trabajo está relacionado con el “reloj de Larmor” para un electrón cruzando una barrera

de potencial y la determinación de tiempo de tuneo [14], pero incluso el cronometraje de una simple partícula con un movimiento libre propone cuestiones interesantes [81]. En principio, y desde la perspectiva de la mecánica clásica, una lectura de la manecilla del reloj despues de que la partícula haya cruzado la región (la partícula debe situarse en el tiempo $t = 0$ dentro de la región) debería proporcionar una medida del tiempo que la partícula ha permanecido en la región. Sin embargo, la interacción entre la partícula y el reloj la perturba y con ello la medida. Esta limitación la expresó Peres [88, 89] como un límite del tiempo de resolución del reloj τ , el tiempo que se requiere para distinguir dos estados ortogonales de la manecilla,

$$\tau E > \hbar, \tag{4.1}$$

para una partícula de energía E . El mismo resultado se obtiene imponiendo que la probabilidad de transmisión sea cercana a 1 [1]; se ha encontrado además en la distribución del tiempo de llegada de Kijowski [6], interpretando τ en este caso como la incertidumbre del tiempo de llegada y E como la energía incidente promedio; por último, surge también como una condición en el análisis que hacen Halliwell y Yearsley del tiempo de llegada cuántico [39]. Si, animados por la coincidencia desde diferentes perspectivas, aplicamos esta inecuación a la energía de un átomo de Cesio en movimiento a las velocidades típicas de un reloj de Cs estándar (entre 100 y 300 m/s), la resolución que se predice es de $\sim 10^{-14}$ s, que es consistente con las precisiones logradas en los años 70 y 80, pero de un orden de magnitud demasiado grande para los relojes de Cs ultrafrío actuales [116]. Si suponemos una velocidad $v=5$ cm/s, una de las velocidades mas pequeñas que se han utilizado hasta ahora en un reloj atomico de Cs en el espacio [56], la “resolución” mínima que resulta de esta expresión es enorme, $\tau > 2\hbar/(mv^2) \sim 0.36 \mu\text{s}$, varios ordenes de magnitud mayor que la precisión constatada en este reloj que es de 10^{-16} s. De hecho, los relojes que utilizan las fuentes de átomos fríos actuales tienen una precisión mucho mejor que las que impone la Ec. (4.1). Parece claro entonces, que una aplicación directa ingenua de la Ec. (4.1) no está justificada. Todo ello nos lleva de nuevo a preguntarnos por el efecto negativo, si lo hay, del movimiento lento de los átomos en los relojes atómicos.

Con independencia de los trabajos sobre “relojes cuánticos”, la metrología de tiempo-frecuencia ha experimentado un progreso excepcional. Precisamente, uno de los principales factores para aumentar en un futuro la exactitud de los relojes atómicos es la utilización conjunta de láseres fríos con átomos a bajas velocidades [116] para que los tiempos de vuelo aumenten y la curva de resonancia se estreche. Por lo tanto existe de hecho la necesidad de conocer la física fundamental de los relojes atómicos en el caso límite

de las bajas energías [99, 69]. El proceso característico de un reloj cuántico descrito anteriormente (la partícula activando una manecilla en una región del espacio), es similar a la física básica de un reloj atómico pero también hay algunas diferencias importantes: para la configuración de un reloj cuántico simple con un solo campo (reloj de Rabi), un átomo en su estado fundamental atraviesa la región del campo en resonancia con la transición hiperfina del átomo, que sufre excitación interna. Como tanto la población del estado fundamental como la del estado excitado oscilan periódicamente con la frecuencia de Rabi Ω cuando un átomo en reposo es introducido en el campo, parece natural -excepto posiblemente a bajas energías- relacionar el tiempo de paso con la fase interna al final de la oscilación, que puede leerse a partir de la población de átomos excitados. En el reloj atómico, sin embargo, la cantidad de interés no es realmente el tiempo de paso, aunque representa un papel importante, sino la frecuencia de la transición. Esta viene determinada por el pico central de la curva de resonancia, cuya anchura es inversamente proporcional al tiempo de paso, como veremos con más detalle: un análisis donde se trata clásicamente la transición de un átomo que atraviesa el campo, válido cuando la energía cinética $E = k^2\hbar/(2m)$ es mayor que otras energías implicadas, $E \gg \hbar\Delta, \hbar\Omega/2$ (Δ es el desintonizado, m la masa, y $k\hbar/m$ la velocidad de la partícula), muestra que la probabilidad de excitación al nivel 2, cuando el átomo está inicialmente en el estado fundamental 1 y la anchura del campo es l , viene dada por

$$P_{12}^{scl}(\Delta) = \frac{\Omega^2}{\Omega^2 + \Delta^2} \sin^2 \left(\frac{\sqrt{\Omega^2 + \Delta^2} T}{2} \right), \quad (4.2)$$

donde $T = lm/(\hbar k)$ es el tiempo de vuelo clásico dentro del campo. Tres propiedades relevantes de P_{12} son (i) el mencionado estrechamiento del pico principal de la curva de resonancia cuando T aumenta, (ii) que el pico está en $\Delta = 0$ independientemente de la velocidad (o lo que es equivalente, de T), y (iii) la simetría respecto $\Delta = 0$, véase la Fig. 4.1. Así, la velocidad no afecta demasiado a la franja central, por lo que la medición de P_{12} se puede usar para dirigir la frecuencia de un oscilador externo cerca de la frecuencia de resonancia, ω_0 . Este proceso será más preciso cuanto más estrecho sea el pico, es decir, para átomos más lentos.

El mecanismo del reloj “fabrica” el segundo al contabilizar un número predeterminado de oscilaciones del campo externo, $\approx 9,2 \times 10^9$ para relojes de Cs, con lo que un desplazamiento del pico de resonancia se traduce en un error en la determinación del segundo que es del orden de una fracción de la

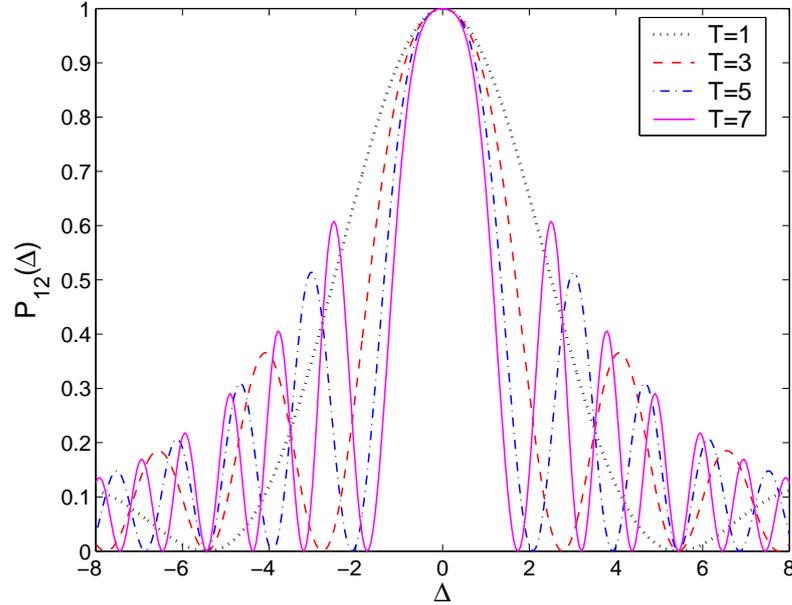


Figura 4.1: El tiempo de vuelo clásico, $T = lm/(\hbar k)$, origina una variación en la anchura de la franjas en la curva de resonancia semiclásica pero mantiene el valor máximo constante en $\Delta = 0$. Curva negra de puntos, $k = 1$; curva roja de trazos, $k = 1/3$; curva azul de trazo y punto, $k = 1/5$; y curva magenta continua, $k = 1/7$. $m = \hbar = l = 1$.

frecuencia.¹

La mayoría de los relojes atómicos actuales utilizan la configuración de Ramsey con dos campos separados en lugar de uno para mejorar sus prestaciones, pero las tres propiedades anteriores de P_{12} también son ciertas con la configuración de Ramsey. En el esquema de Ramsey, el tiempo de vuelo libre entre campos representa el papel de T como el parámetro a maximizar, dentro de unas limitaciones técnicas, para estrechar la curva de resonancia.

Primero vamos a restringir, por simplicidad, el estudio a la configuración de Rabi mostrada en la Fig. 4.2, y después extenderemos los resultados a la configuración de Ramsey, porque la manipulación matemática es muy similar pero mucho más engorrosa.

Nuestro principal objetivo es calcular el error relativo de la frecuencia de un reloj cuando la velocidad incidente es “lenta”: se define como el valor absoluto del cambio en la posición del pico de $P_{12}(\Delta)$ con respecto al valor ideal $\Delta = 0$, dividido entre la frecuencia de la transición atómica. El término “ve-

¹A no ser, por supuesto, que la magnitud de este desplazamiento sea bien conocida y se pueda predecir, con lo que se podría corregir manualmente.

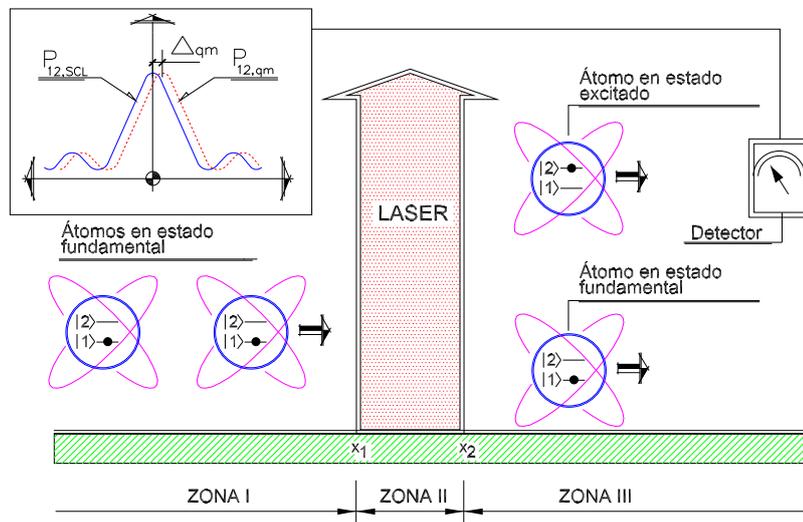


Figura 4.2: Esquema del funcionamiento de un reloj atómico de Rabi. El átomo en el estado fundamental $|1\rangle$ está en la zona I, avanza hacia la cavidad de microondas II donde actúa un pulso π de frecuencia ω_L , finalmente abandona la cavidad hacia la zona III, y el estado interno del átomo puede haber cambiado a un estado excitado, $|2\rangle$, o permanecer en el estado fundamental $|1\rangle$.

locidad lenta” es sutil y precisa alguna aclaración: consideraremos velocidades para las que el resultado semiclásico (con el pico máximo en $\Delta = 0$) tiene que ser *corregido* por métodos perturbativos debido al movimiento cuántico, pero tales que el modelo de interferencia global mantenga esencialmente la misma forma que en límite semiclásico. Físicamente, esto significa que la reflexión producida por el campo es todavía muy pequeña y $E \gg \Omega\hbar$. Esto nos permitirá encontrar las correcciones resolviendo exactamente primero las ecuaciones de la dinámica cuántica y después, tomando el término dominante y la primera corrección en el desarrollo de “grandes k ”. Un ejemplo del régimen perturbativo se muestra en la Fig. 4.3a, donde la curva cuántica se parece, pero es ligeramente diferente, a la curva semiclásica. Insistimos que este régimen puede de hecho contener velocidades muy pequeñas según otros criterios, como las de la Fig. 4.3a, que, aunque son exageradamente lentas para cualquier reloj atómico real, son útiles para ilustrar con claridad y a simple vista las principales características de la curva cuántica, en particular la asimetría, y la posición del máximo muy cerca de $\Delta = 0$ (de hecho, el máximo esta ligeramente desplazado como se discutirá mas adelante en detalle).

La reflexión producida por el campo es importante en el caso $E \leq \Omega/\hbar$, y el patrón de interferencia se deforma drásticamente. Para la configuración de Ramsey esto implica un escenario de colisiones múltiples, resonancias de Fabry-Perot muy sensibles a la velocidad [99] y la existencia de un umbral de P_{12} que depende del desintonizado Δ . Este régimen extremo, véase un ejemplo en la Fig. 4.3b, está fuera del dominio de la metrología de tiempo-frecuencia actual por lo que nos vamos a concentrar en el régimen perturbativo.

El objetivo es evaluar cuantitativamente $P_{12}(\Delta)$ para los átomos transmitidos. Para ello usaremos un modelo simplificado unidimensional con Hamiltoniano efectivo

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \hbar\Delta|2\rangle\langle 2| + \frac{\hbar}{2}\Omega(x)(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|), \quad (4.3)$$

que se obtiene [62, 93], suponiendo que la función de onda viajera es semiclásica, y aplicando la aproximación de onda rotante (RWA) y la aproximación dipolar. El campo efectivo de microondas se puede realizar mediante dos láseres copropagantes, perpendiculares al movimiento de los átomos, y que induce en estos una transición Raman [110, 115]. En este caso el desintonizado efectivo Δ contiene, además de la diferencia entre la frecuencia efectiva del campo (que es la diferencia entre las frecuencias de láseres) y la frecuencia de la transición, el término de retroceso $-k_L^2\hbar/(2m)$, donde k_L es el número de onda efectivo (diferencia entre los números de onda de los dos

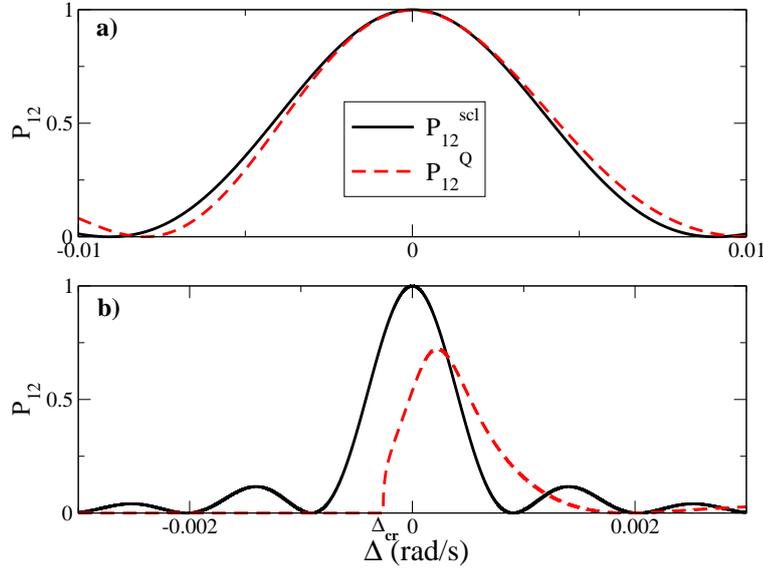


Figura 4.3: Esquema de Rabi (un solo campo). (a) Régimen perturbativo: los máximos de las probabilidades exacta, P_{12}^Q , y semiclassical, P_{12}^{scl} , prácticamente coinciden en $\Delta = 0$ para un pulso π . Sin embargo, se distingue la asimetría y un desplazamiento entre ellas a media altura. Datos: $l = 3$ mm y $v = 5$ $\mu\text{m/s}$. (b) Régimen dominado por las reflexiones: en este caso la probabilidad cuántica exacta, P_{12}^Q , es más estrecha, está visiblemente deformada ($v = 0,5$ $\mu\text{m/s}$, obsérvese la diferencia de escalas), y comienza en el punto de desintonizado crítico. En (a) y (b) La frecuencia de Rabi se fija con la condición de pulso π , $\Omega = \pi v/l$. La masa de Cs que se usa en todas las figuras es: $m(\text{Cs}) = 2,2 \times 10^{-25}$ Kg.

láseres). Finalmente, $\Omega(x)$ es la frecuencia de Rabi efectiva, que se considera constante dentro de la región iluminada y cero fuera de ella.

Ya que lo que queremos es encontrar la solución exacta de la ecuación de Schrödinger correspondiente a (4.3), comenzamos por resolver la ecuación estacionaria de Schrödinger (EES) para cada zona etiquetada con el índice α : a la izquierda del campo ($\alpha = I$), dentro del campo ($\alpha = II$), y a la derecha del campo ($\alpha = III$),

$$\hat{H}_\alpha \phi_\alpha = E \phi_\alpha; (\alpha = I, II, III), \quad (4.4)$$

donde ϕ_α es un vector de onda de dos componentes

$$\phi_\alpha = \begin{pmatrix} \phi_\alpha^{(1)} \\ \phi_\alpha^{(2)} \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

i) Para $\alpha = I$,

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} - \hbar\Delta|2\rangle\langle 2| \right) \phi_I = E\phi_I \quad (4.6)$$

se reduce a dos ecuaciones desacopladas para $\phi_I^{(1)}$ y $\phi_I^{(2)}$. La solución general (delta-normalizada en el espacio k) es

$$\phi_I = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} [(a_I e^{ikx} + b_I e^{-ikx})|1\rangle + (c_I e^{iqx} + d_I e^{-iqx})|2\rangle], \quad (4.7)$$

donde $q = \sqrt{k^2 + 2m\Delta/\hbar}$ y $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$.

ii) Para la región de interacción, $\alpha = II$,

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} - \hbar\Delta|2\rangle\langle 2| + \frac{\hbar}{2}\Omega(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|) \right] \phi_{II} = E\phi_{II}. \quad (4.8)$$

Diagonalizando la parte del Hamiltoniano que contiene la interacción, obtenemos sus vectores de onda y sus autoestados $|\lambda_\pm\rangle$,

$$|\lambda_\pm\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{2\lambda_\pm}{\Omega} \end{pmatrix}, \quad (4.9)$$

donde $\lambda_\pm = \frac{-\Delta \pm \Omega'}{2}$ y $\Omega' = \sqrt{\Delta^2 + \Omega^2}$.

De las ecuaciones (4.11) y (4.9) podemos escribir la solución de la EES en $\alpha = II$ como

$$\begin{aligned} \phi_{II} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} [(a_{II} e^{ik+x} + b_{II} e^{-ik+x})|\lambda_+\rangle \\ &+ (c_{II} e^{ik-x} + d_{II} e^{-ik-x})|\lambda_-\rangle], \end{aligned} \quad (4.10)$$

cumpliéndose la relación

$$\frac{\hbar^2 k_\pm^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \hbar\lambda_\pm. \quad (4.11)$$

iii) Por último, para $\alpha = III$ tenemos, igual que para $\alpha = I$,

$$\phi_{III} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} [(a_{III} e^{ikx} + b_{III} e^{-ikx})|1\rangle + (c_{III} e^{iqx} + d_{III} e^{-iqx})|2\rangle]. \quad (4.12)$$

En todos los casos, $\alpha = I, II, III$, es conveniente introducir el vector de coeficientes

$$\mathbf{v}_\alpha = (a_\alpha, b_\alpha, c_\alpha, d_\alpha)^{\mathcal{T}}, \quad (4.13)$$

donde \mathcal{T} significa “traspuesto”.

4.2. Matrices de Transferencia y Probabilidad de excitación

Vamos a considerar una onda plana $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}$, incidente desde la izquierda ($x \rightarrow -\infty$), con el átomo en el estado fundamental $|1\rangle$ por lo que $a_I = 1$, $c_I = 0$, $b_{III} = d_{III} = 0$. Tras interactuar con la “barrera”, el átomo transmitido que viaja hacia $x \rightarrow \infty$ puede permanecer en $|1\rangle$ o estar excitado en $|2\rangle$, tal que

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_I &= (1, r_{11}, 0, r_{12})^T, \\ \mathbf{v}_{III} &= (t_{11}, 0, t_{12}, 0)^T, \end{aligned} \quad (4.14)$$

donde r_{ij}, t_{ij} son las amplitudes de reflexión y transmisión para el caso de incidencia desde el lado izquierdo en el estado interno $i = 1, 2$ y salida en el estado interno $j = 1, 2$.

Introduzcamos ahora para las regiones exteriores, $\alpha = I, III$, un vector cuyas componentes sean las amplitudes y sus derivadas espaciales,

$$\begin{pmatrix} \phi_\alpha^{(1)}(x) \\ \phi_\alpha^{(2)}(x) \\ \dot{\phi}_\alpha^{(1)}(x) \\ \dot{\phi}_\alpha^{(2)}(x) \end{pmatrix} = M_0(x)\mathbf{v}_\alpha, \quad (4.15)$$

e igualmente, dentro del campo ($\alpha = II$)

$$\begin{pmatrix} \phi_{II}^{(1)}(x) \\ \phi_{II}^{(2)}(x) \\ \dot{\phi}_{II}^{(1)}(x) \\ \dot{\phi}_{II}^{(2)}(x) \end{pmatrix} = M_b(x, \phi_1)\mathbf{v}_{II}, \quad (4.16)$$

donde el punto representa la derivada con respecto a x . La forma explícita de las matrices $M_0(x)$ y $M_b(x)$ es

$$M_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} e^{ikx} & e^{-ikx} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{iqx} & e^{-iqx} \\ ik e^{ikx} & -ik e^{-ikx} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i q e^{iqx} & -i q e^{-iqx} \end{pmatrix}, \quad (4.17)$$

$$M_b(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} e^{ik_+x} & e^{-ik_+x} & e^{ik_-x} & e^{-ik_-x} \\ \frac{2\lambda_+ e^{ik_+x}}{\Omega} & \frac{2\lambda_+ e^{-ik_+x}}{\Omega} & \frac{2\lambda_- e^{ik_-x}}{\Omega} & \frac{2\lambda_- e^{-ik_-x}}{\Omega} \\ ik_+ e^{ik_+x} & -ik_+ e^{-ik_+x} & ik_- e^{ik_-x} & -ik_- e^{-ik_-x} \\ \frac{2ik_+\lambda_+ e^{ik_+x}}{\Omega} & \frac{-2ik_+\lambda_+ e^{-ik_+x}}{\Omega} & \frac{2ik_-\lambda_- e^{ik_-x}}{\Omega} & \frac{-2ik_-\lambda_- e^{-ik_-x}}{\Omega} \end{pmatrix}. \quad (4.18)$$

Las condiciones de continuidad en x_1 y x_2 para las funciones de onda y sus derivadas son

$$\phi_I(x_1) = \phi_{II}(x_1), \quad (4.19)$$

$$\phi_{II}(x_2) = \phi_{III}(x_2), \quad (4.20)$$

$$\left[\frac{d\phi_I(x)}{dx} \right]_{x=x_1} = \left[\frac{d\phi_{II}(x)}{dx} \right]_{x=x_1}, \quad (4.21)$$

$$\left[\frac{d\phi_{II}(x)}{dx} \right]_{x=x_2} = \left[\frac{d\phi_{III}(x)}{dx} \right]_{x=x_2}. \quad (4.22)$$

Se pueden escribir en forma matricial y más compacta como

$$M_0(x_1)\mathbf{v}_I = M_b(x_1)\mathbf{v}_{II}, \quad (4.23)$$

$$M_b(x_2)\mathbf{v}_{II} = M_0(x_2)\mathbf{v}_{III}. \quad (4.24)$$

Eliminando \mathbf{v}_{II} del sistema anterior, llegamos finalmente a la matriz de transferencia $\mathsf{T}(x_1, x_2, \phi_1)$ que conecta las amplitudes de los vectores a ambos lados de la barrera,

$$\mathbf{v}_I = \mathsf{T}(x_1, x_2)\mathbf{v}_{III}, \quad (4.25)$$

y cuya forma explícita es el producto de matrices

$$\mathsf{T}(x_1, x_2) = M_0(x_1)^{-1}M_b(x_1)M_b(x_2)^{-1}M_0(x_2). \quad (4.26)$$

Usando las ecuaciones (4.14,4.17,4.18) podemos calcular la amplitud de transmisión del proceso de paso del estado fundamental $|1\rangle$, procedente desde la izquierda, al estado excitado $|2\rangle$ como

$$t_{12} = \frac{\mathsf{T}_{31}}{\mathsf{T}_{31}\mathsf{T}_{13} - \mathsf{T}_{33}\mathsf{T}_{11}}. \quad (4.27)$$

Así, la probabilidad cuántica exacta es, generalizando el resultado semiclásico (4.2),

$$P_{12}^Q(\Delta) = \frac{q}{k} |t_{12}|^2. \quad (4.28)$$

4.3. Desplazamientos debidos al movimiento cuántico

Consideraremos dos clases diferentes de desplazamientos, $\Delta_Q^{(M)}$ y $\Delta_Q^{(hh)}$: el primero es el desplazamiento del máximo del pico de resonancia respecto a $\Delta = 0$; el segundo es el desplazamiento del valor medio de la curva de resonancia a media altura. Como vemos en la Fig. 4.3 su comportamiento es muy

distinto, el primero es despreciable a simple vista mientras que el segundo es muy significativo. En este capítulo proporcionaremos una expresión analítica para el primero y resultados numéricos para el último.

Lo primero es calcular el valor máximo de $P_{12}^Q(\Delta)$ a partir de

$$\frac{dP_{12}^Q}{d\Delta} = 0 \quad (4.29)$$

teniendo en cuenta la Ec. (4.28) y sabiendo que

$$\frac{dq}{d\Delta} = \frac{m}{q\hbar}, \quad (4.30)$$

$$|t_{12}^L|^2 = (t_{12}^L)(t_{12}^L)^*, \quad (4.31)$$

el máximo debe cumplir

$$t_{12}t_{12}^* + \frac{q^2\hbar}{m} \left(\frac{dt_{12}}{d\Delta}t_{12}^* + t_{12}\frac{dt_{12}^*}{d\Delta} \right) = 0. \quad (4.32)$$

La expresión explícita en función de las variables v, L, Ω es complicada, debido a que cada elemento T_{ij} de la matriz $T(x_1, x_2)$ en la Ec. (4.27) resulta de multiplicar cuatro matrices 4×4 . Para simplificar primero eliminaremos Ω imponiendo la condición $\Omega = \frac{\hbar k \pi}{lm}$, que es la condición semiclassical para un pulso π en $\Delta = 0$, y luego desarrollamos t_{12} en potencias de Δ hasta segundo orden,

$$t_{12,\Delta} \approx \gamma_0(k) + \gamma_1(k)\Delta + \gamma_2(k)\Delta^2, \quad (4.33)$$

donde

$$\gamma_0 = [t_{12}]_{\Delta=0}, \quad (4.34)$$

$$\gamma_1 = \left[\frac{\partial t_{12}}{\partial \Delta} \right]_{\Delta=0}, \quad (4.35)$$

$$\gamma_2 = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2 t_{12}}{\partial \Delta^2} \right]_{\Delta=0}. \quad (4.36)$$

Ahora, la probabilidad $P_{12}^Q(\Delta)$ se puede expresar aproximadamente como

$$P_{12}^Q(\Delta) = \frac{q}{k} |(\gamma_0 + \gamma_1\Delta + \gamma_2\Delta^2)|^2. \quad (4.37)$$

Sustituyendo los desarrollos en la Ec. (4.32),

$$|(\gamma_0 + \gamma_1\Delta + \gamma_2\Delta^2)|^2 + 2q^2 \frac{\hbar}{m} \text{Re} [(\gamma_1 + 2\gamma_2\Delta)(\gamma_0 + \gamma_1\Delta + \gamma_2\Delta^2)^*] = 0. \quad (4.38)$$

Reagrupando términos, truncándolos a primer orden de Δ y usando

$$\begin{aligned}\theta_0(k) &= \gamma_0\gamma_0^* + q^2 \frac{\hbar}{m}(\gamma_1\gamma_0^* + \gamma_0\gamma_1^*), \\ \theta_1(k) &= (\gamma_1\gamma_0^* + \gamma_0\gamma_1^*) + 2q^2 \frac{\hbar}{m}(\gamma_1\gamma_1^* + \gamma_2\gamma_0^* + \gamma_0\gamma_2^*),\end{aligned}$$

el pico del máximo debe cumplir

$$\theta_0(k) + \theta_1(k)\Delta + \mathcal{O}(\Delta^2) = 0,$$

la cual se puede resolver reteniendo el término dominante en k para encontrar la expresión explícita del desplazamiento

$$\Delta_Q^{(M)}(k) = \frac{\hbar^2\pi^4}{16m^2v l^3} \sin(2kl), \quad (4.39)$$

donde $v = k\hbar/m$ es la velocidad de la partícula, véase la Fig. 4.4a, y el superíndice M indica que el desplazamiento se refiere al “máximo” de la curva.

Podemos proceder de manera similar para la configuración de Ramsey, cuya curva de densidad de probabilidad semiclásica viene dada por

$$\begin{aligned}P_{12}^{scl}(\Delta) &= 4 \frac{\Omega^2}{\Omega^2 + \Delta^2} \sin^2 \left(\frac{\sqrt{\Omega^2 + \Delta^2} T}{2} \right) \left[\cos \left(\frac{m\Delta L}{2\hbar k} \right) \cos \left(\frac{m\sqrt{\Omega^2 + \Delta^2} l}{2\hbar k} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{\Delta}{\sqrt{\Omega^2 + \Delta^2}} \sin \left(\frac{m\Delta L}{2\hbar k} \right) \sin \left(\frac{m\sqrt{\Omega^2 + \Delta^2} l}{2\hbar k} \right) \right]^2, \quad (4.40)\end{aligned}$$

y escribir una matriz de transferencia que por supuesto es más engorrosa pero que se puede calcular con la ayuda de un programa informático de manipulación algebraica. Esta nueva matriz de transferencia depende, además de los parámetros ya vistos, de la distancia entre campos L . Para “grandes” k , un gran ratio $N = L/l$, e imponiendo pulsos $\pi/2$ en cada campo, ahora $\Omega = \frac{\hbar k \pi}{2lm}$, encontramos la envolvente aproximada

$$(\Delta_Q^{(M)})_{env} = \pm \frac{\hbar^2\pi^2}{16m^2v l^3 N}. \quad (4.41)$$

Los desplazamientos de Ramsey son considerablemente menores que los de Rabi debido al N en el denominador. Comparándolo con el caso de Rabi, el desplazamiento de Ramsey oscila respecto a k con un periodo corto π/L , superpuesto a un periodo largo π/l , véase la Fig. 4.4b,c. Estos desplazamientos son en cualquier caso bastante pequeños y, además, oscilan rápidamente con

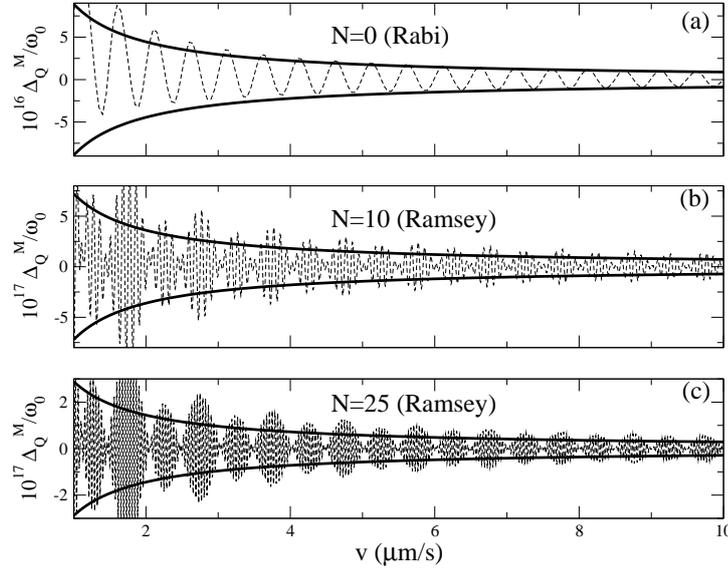


Figura 4.4: Comparación entre los valores numéricos (líneas discontinuas) y los valores analíticos (líneas continuas), del cociente Δ_Q/ω_0 para un átomo de cesio a diferentes velocidades. (a) Configuración de Rabi de un pulso- π con $l = 3$ mm, la frecuencia de Rabi se fija por la condición de pulso- π , $\Omega = \pi v/l$. Para los resultados analíticos solo se han representado las envolventes superior e inferior de la Ec. (4.39). Las aproximaciones son mejores para las velocidades más altas. (b) y (c) pulsos $\pi/2$ de Ramsey con $l = 1,5$ mm y separados L , ($N = L/l$), la frecuencia de Rabi se fija por la condición de pulso- $\pi/2$, $\Omega = \pi v/2l$.

respecto a v por lo que su efecto promedio se anula al considerar la dispersión de velocidades de una nube atómica.

Sin embargo hay un segundo tipo de desplazamiento que es muy importante en la práctica: se define como el valor medio del desintonizado en la curva de resonancia medido a media altura del pico central, $\Delta_Q^{(hh)}$. Numéricamente encontramos que el pico de resonancia es asimétrico, este desplazamiento no oscila alrededor del cero sino que tiende hacia un valor constante para k “grandes” una vez fijados l y L .

Como se aprecia en la Fig. 4.3a, este desplazamiento es más significativo que el anterior, tanto porque su magnitud es mayor como porque no depende de la velocidad, como se aprecia en la Fig. 4.5. La curva cuántica de excitación tiende a coincidir con la curva semiclásica cuando se comparan

“verticalmente” aumentando v y para un Δ dado, $P_{12}^Q - P_{12}^{scl} \rightarrow 0$. Esto es compatible con el hecho de que, cuando comparamos “horizontalmente” a media altura, las dos curvas están separadas por un desplazamiento que permanece constante cuando aumentamos v , véase la Fig. 4.5. Si representamos únicamente el pico central, véase la Fig. 4.3, este desplazamiento constante es cada vez menos visible debido al ensanchamiento del pico y al cambio de escala cuando v aumenta. Un argumento sencillo puede ayudarnos a entender intuitivamente este fenómeno proporcionando las dependencias relevantes. Primero observemos que el número de onda q no es una función par respecto a Δ lo que proporciona una asimetría: el átomo excitado se encuentra un potencial fundamental más bajo con un desintonizado positivo que con uno negativo y la probabilidad cuántica de excitación a media altura puede aproximarse como $(q/k)P^{scl}$, véase la Ec. (4.28), o simplemente $q/(2k)$, mayor que $1/2$ para desintonizados positivos y menores que $1/2$ en otro caso. Desarrollando para k grandes, y tomando aproximadamente Δ a la mitad de la distancia hasta el primer cero, la diferencia vertical entre la curva cuántica y la curva semiclásica a media altura es, para el esquema de Rabi, $\approx \pi/(4kl)$. Por otro lado la pendiente, estimada nuevamente desde el cero y para el caso de Rabi es $\approx lm/(\hbar k\pi)$. Como esta pendiente también es la relación entre los desplazamientos vertical y horizontal, resulta un desplazamiento horizontal independiente de k y proporcional a l^{-2} para una excitación de tipo Rabi,² o proporcional a L^{-2} para excitaciones del tipo Ramsey y valores grandes de N . Estas dependencias se confirman en las Figs. 4.5, 4.6, y 4.7.

4.4. Conclusiones

El límite en la resolución de un reloj cuántico, Ec. (4.1), sugiere que existen limitaciones en la precisión de los relojes atómicos a medida que las velocidades de los átomos se van haciendo más pequeñas. Una de las maneras de obtener la Ec. (4.1) se basa en la reflexión de partículas debida a la presencia del campo. Para que un haz atómico que atraviesa un campo en resonancia no sufra reflexión debe cumplirse $E \gg \Omega\hbar$, que recuerda la relación de Peres. Sin embargo $1/\Omega$ no representa un papel importante en la resolución de un reloj atómico, que es hoy en día incluso mucho mejor que el periodo de la oscilación de la transición atómica, un modesto $10^{-10}s$. Motivados por el hecho de que una ingenua aplicación de la Ec. (4.1) no proporciona una estimación válida del límite a energías bajas de los relojes atómicos, y porque, sin embargo, la tendencia a usar velocidades atómicas

²El desplazamiento total esperado es $\hbar\pi^2/(4ml^2)$, que proporciona muy buenos resultados dado el nivel de aproximación del argumento.

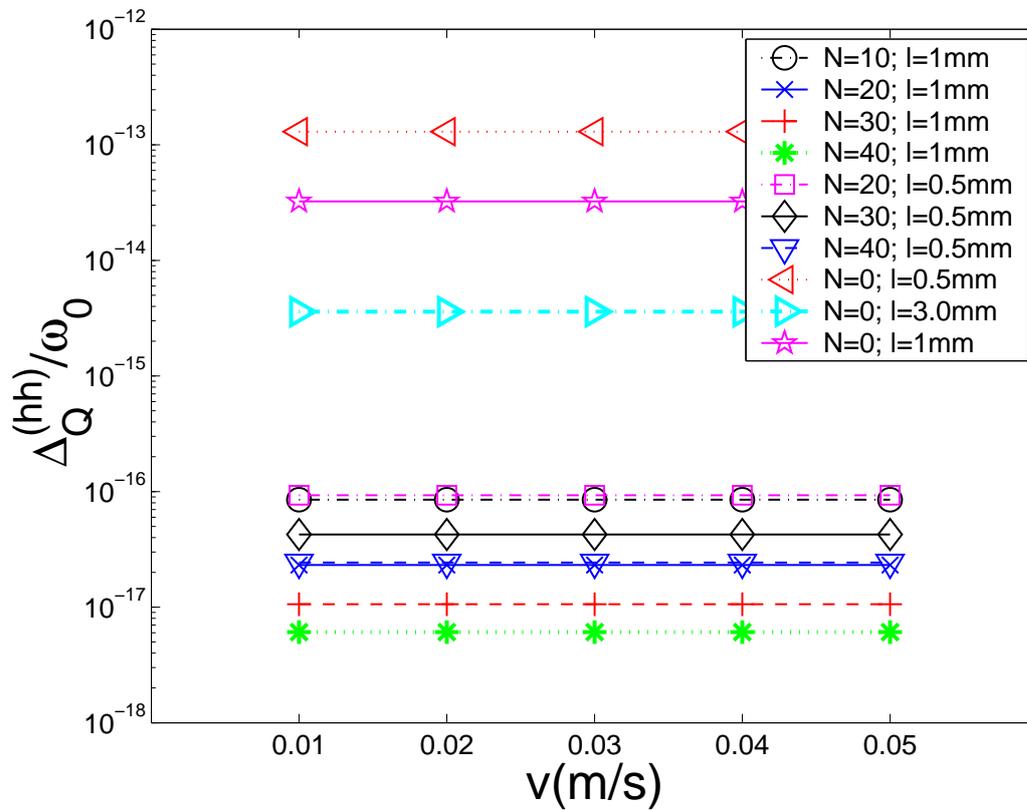


Figura 4.5: Comprobación de la independencia del desplazamiento medido a media altura en las configuraciones de Rabi ($N = 0$) y Ramsey, respecto a la velocidad incidente para diferentes valores de l y $N = L/l$. Resultados exactos.

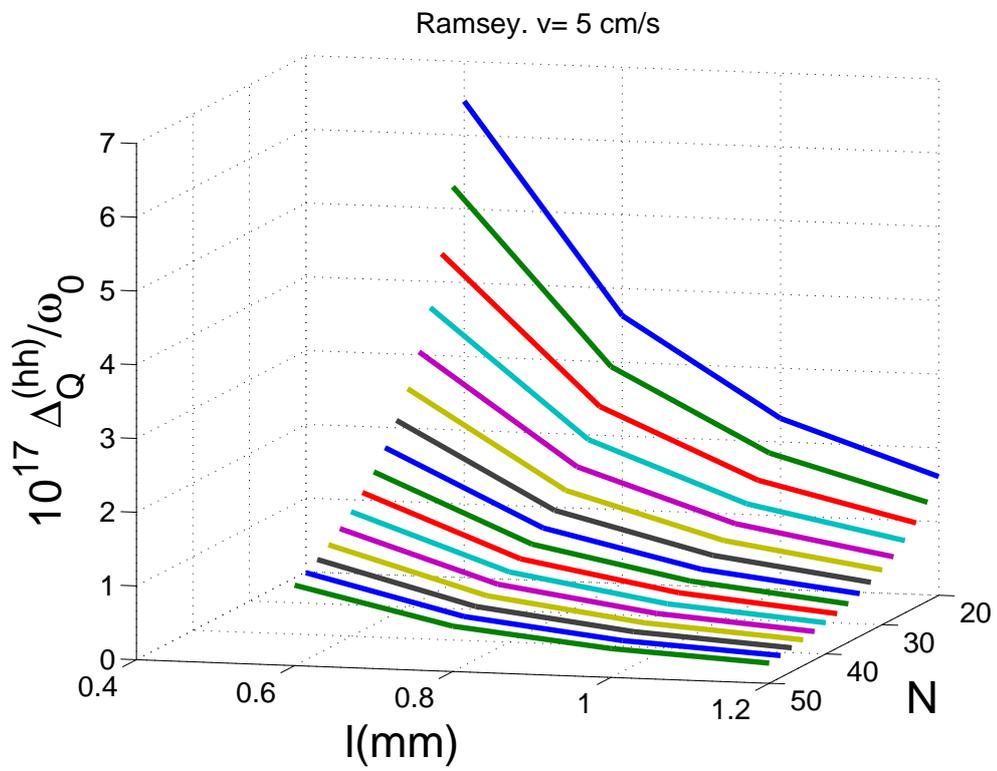


Figura 4.6: Relación entre el desplazamiento cuántico a media altura y la frecuencia de la transición frente a l y $N = L/l$ para $v = 5 \text{ cm/s}$. Resultados exactos.

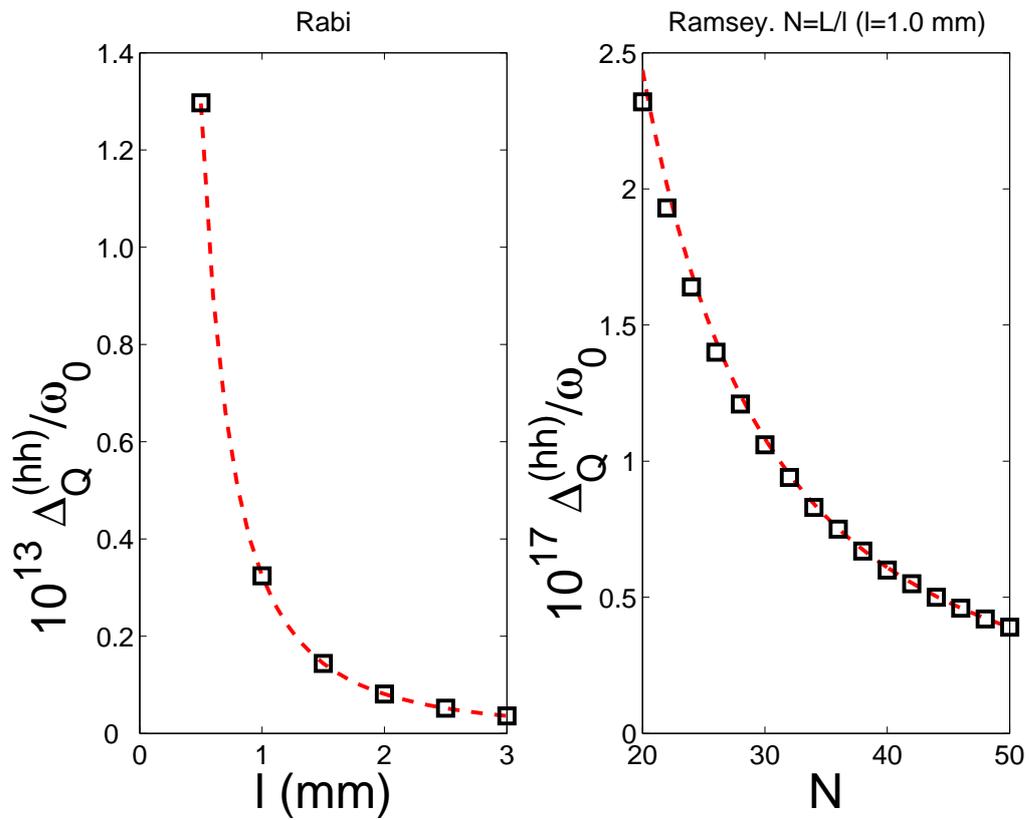


Figura 4.7: Relación entre el desplazamiento cuántico a media altura y la frecuencia de la transición frente a l y $N = L/l$ para $v = 5$ cm/s. Resultados exactos (cuadrados) y demostración que coincide con la ley l^{-2} en la configuración de Rabi y L^{-2} en la de Ramsey (líneas de trazos).

cada vez menores requiere este tipo de información, hemos investigado los desplazamientos de las curvas de resonancia utilizadas en relojes atómicos con las configuraciones tipo de Rabi y Ramsey debido al efecto cuántico que produce el movimiento atómico. Hemos proporcionado expresiones explícitas para el desplazamiento del máximo, Ecs. (4.39) y (4.41), pero este efecto es bastante pequeño comparado con la asimetría del pico, y además se cancelaría si se promedia sobre las velocidades incidentes. En cambio, cuando la resonancia se define mediante el punto medio del segmento que une puntos de la curva de resonancia situados a media altura, la asimetría del pico implica un desplazamiento significativo, varios órdenes de magnitud mayor que el desplazamiento del máximo, y que además es robusto con respecto al promedio de momentos. Ambos desplazamientos son menores en el esquema de Ramsey que en el esquema de Rabi, pero incluso el desplazamiento debido a la asimetría debería tenerse en cuenta en el cómputo de errores de los relojes de tipo Raman-Ramsey más precisos. Este error se puede reducir aumentando el ancho de la región de interacción campo-átomo, y, en el esquema de Ramsey, aumentando la longitud de vuelo-libre. Estos resultados sugieren el estudio de efectos similares en configuraciones con ondas estacionarias en lugar de ondas viajeras y para campos con perfiles de intensidad suavizados.

Finalmente, quisiera comentar si estas limitaciones son o no aplicables a los diseños de relojes atómicos basados en trampas de iones y pulsos variables en el tiempo en lugar de estar fijos en el espacio. Como el ión está atrapado, podría parecer que el sistema está libre de los desplazamientos derivados del movimiento-cuántico pero este no es caso. Se han proporcionado también expresiones para los correspondientes desplazamientos en [63].

Capítulo 5

Construcción de operadores de tiempo: covarianza, criterios de selección y ejemplos

What we observe is not nature itself, but nature exposed to our method of questioning.

Werner Heisenberg

En este capítulo se proporciona la forma más general de los operadores de tiempo covariantes y normalizados y sus densidades de probabilidad, con aplicaciones a los relojes cuánticos, el tiempo de llegada y a los operadores cuánticos de Lyapunov. Se discuten ejemplos de posibles operadores y su significado físico, y se proporcionan criterios para definir un operador único y óptimo en casos concretos [43].

5.1. Introducción

La teoría cuántica proporciona, para un estado con una preparación específica, los valores esperados y las distribuciones de un número de observables cuyos operadores se identifican mediante una combinación de argumentos heurísticos (p. e. las reglas de cuantización) y argumentos de consistencia. Su validez y relevancia se pone a prueba finalmente mediante los experimentos. Los observables de tiempo, como el tiempo de llegada de partículas a un detector, han sido mucho más problemáticos que otros observables como la “energía”, el “momento lineal” o la “posición” evaluados en un instante dado. En realidad casi un siglo después de la creación del formalismo cuántico

básico, todavía se está debatiendo el marco teórico de observables de tiempo cuya definición operacional, en el laboratorio, es relativamente sencilla. Dos reciente libros [77, 76] discuten diferentes aspectos de las dificultades y esfuerzos realizados para formalizar el tiempo en mecánica cuántica. Algunas de estas dificultades se resumen en la falta de una “guía” a seguir para generar y definir “operadores de tiempo”. Un punto importante, frecuentemente pasado por alto, es que, para un sistema determinado, no hay un único operador de tiempo. En realidad existen infinidad de operadores de tiempo correspondientes a diferentes observables y aparatos de medida. Se han definido los llamados “operadores canónicos de tiempo” [47, 38, 37], pero, como discutiremos más adelante, la definición de “canónico”, incluso sin degeneración de la energía, depende de la base que se utilice. Es necesario por tanto realizar un análisis más profundo para definir operadores ideales y en algunos casos posiblemente establecer su unicidad, imponiendo bien restricciones físicas que deben ser satisfechas (p. e. simetrías) o propiedades de optimización, como puede ser la exigencia de que la varianza del operador sea mínima.

Los operadores de tiempo se pueden clasificar en dos grupos principales, dependiendo de que se consideren “intervalos” o “instantes”. Un ejemplo de intervalo es el tiempo de permanencia de una partícula en una región del espacio. El correspondiente operador conmuta con el Hamiltoniano porque la duración del proceso no depende del instante que elegimos para predecirlo [81] como se ha discutido ampliamente en el Capítulo 2. En cambio, el otro grupo de observables de tiempo sí depende del momento de inicio de la medición y se desplaza la misma cantidad que el desplazamiento del origen de tiempo correspondiente a la preparación del sistema, ya sea hacia adelante (relojes) [96] o hacia atrás (eventos temporales registrados con un cronómetro como el tiempo de llegada), y los operadores son conjugados con el Hamiltoniano. En este capítulo vamos a presentar el marco formal para construir estos observables “covariantes” [47] asociados con instantes y analizaremos su multiplicidad y propiedades físicas. Se discutirán sus aplicaciones a los relojes cuánticos, al tiempo de llegada y a los operadores de Lyapunov.

El esquema del capítulo es el siguiente: Después de introducir los conceptos principales y la notación en la Sec. 5.2, en la Sec. 5.3 se determina la forma más general de un operador de tiempo covariante para sistemas con un Hamiltoniano de espectro continuo, y posiblemente degenerado. En la Sección 5.4 se muestra que, para un Hamiltoniano invariante frente a la inversión temporal, se llega a una forma de operador de tiempo única y natural imponiendo la inversión temporal covariante, invariancia bajo simetrías adicionales, y mínima varianza. En la Sección 5.5 se aplican los resultados al cálculo del tiempo de llegada de partículas en movimiento en un semi-espacio

infinito en 1D y se establece una conexión con el tiempo de retardo de Smith [101]. En la Sección 5.6 se aplican los resultados a los operadores de Lyapunov considerados en la Ref. [108]. Se muestra que la expresión hallada allí es un caso especial, y se presentan las condiciones para establecer la forma única más general posible. En particular, esto muestra que para un Hamiltoniano invariante bajo inversión temporal no existen operadores de Lyapunov invariantes bajo inversión temporal. Esto es interesante porque se ha defendido que, para caracterizar un sistema cuántico como irreversible y definir una flecha del tiempo si el Hamiltoniano es invariante bajo una inversión temporal y se usa la formulación en términos de operadores o funcionales de Lyapunov, estos deberían ser invariantes frente a la inversión temporal [100].

5.2. Covarianza de los operadores de tiempo. Notación.

Es importante diferenciar entre los operadores de tiempo tipo reloj y los operadores de tiempo tipo cronómetro. Los primeros, escritos como \hat{T} , se pueden asociar con un reloj cuántico que mide el progreso del tiempo paramétrico, mientras que los segundos, escritos como \hat{T}^A , describen el tiempo en que sucede un evento, por ejemplo, el instante de tiempo en el que se localiza una partícula que llega a una posición en particular. Esta y las siguientes dos secciones están dedicadas casi por completo a los observables tipo reloj, aunque los resultados formales son análogos para los de tipo cronómetro. En un reloj ordinario la posición de la manecilla es el observable que nos dice qué hora es. En un reloj cuántico, sin embargo, la manecilla “posición” es probabilística, pero su valor promedio debe de ser fiel al avance del tiempo paramétrico. Nos gustaría también minimizar la varianza y estimar el tiempo de la forma más precisa posible con un número finito de mediciones. No investigaremos aquí realizaciones específicas, que se han discutido por ejemplo en [96], sino operadores idealizados y sus propiedades.

5.2.1. Operadores de tiempo de reloj

Para un estado $|\psi\rangle$ dado, consideremos que la probabilidad de encontrar el tiempo medido en el intervalo $(-\infty, \tau)$ viene dada por el valor esperado para $|\psi\rangle$ de un operador \hat{F}_τ . Hay que observar que $0 \leq \hat{F}_\tau \leq 1$, de forma que \hat{F}_τ es autoadjunto y acotado. (Para medidas del momento lineal el operador análogo correspondiente a encontrar el momento en $(-\infty, p)$ sería $\int_{-\infty}^p dp' |p'\rangle\langle p'|$. Sin embargo, aquí \hat{F}_τ puede tener una forma más general.)

Entonces

$$\Pi(\tau; \psi) \equiv \frac{d}{d\tau} \langle \psi | \hat{F}_\tau | \psi \rangle \quad (5.1)$$

es la correspondiente densidad de probabilidad temporal, normalizada como $\int d\tau \Pi(\tau; \psi) = 1$. Definimos el operador de densidad de probabilidad $\hat{\Pi}_\tau$ como

$$\hat{\Pi}_\tau \equiv \frac{d}{d\tau} \hat{F}_\tau, \quad (5.2)$$

normalizado como¹

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\tau \hat{\Pi}_\tau = \hat{1}. \quad (5.3)$$

El valor esperado del tiempo observado se puede escribir como

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\tau \tau \Pi(\tau; \psi) = \langle \psi | \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \tau \hat{\Pi}_\tau | \psi \rangle \equiv \langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle, \quad (5.4)$$

donde al operador

$$\hat{T} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \tau \hat{\Pi}_\tau \quad (5.5)$$

se le denomina operador de tiempo asociado con $\hat{\Pi}_\tau$. El segundo momento, en caso de existir, viene dado por

$$\int d\tau \tau^2 \Pi(\tau; \psi) = \langle \psi | \int d\tau \tau^2 \hat{\Pi}_\tau | \psi \rangle \quad (5.6)$$

y de forma similar se pueden definir momentos de orden superior. Puede ocurrir que la anterior integral no sea igual a $\langle \psi | \hat{T}^2 | \psi \rangle$.

Un operador de reloj es covariante con respecto al tiempo ordinario (paramétrico) si para los estados $|\psi\rangle \equiv |\psi_0\rangle$ y $|\psi_t\rangle$ las probabilidades de encontrar una medición de tiempo en los respectivos intervalos $(-\infty, \tau)$ y $(-\infty, \tau + t)$ coinciden, es decir, si

$$\langle \psi_0 | \hat{F}_\tau | \psi_0 \rangle = \langle \psi_t | \hat{F}_{\tau+t} | \psi_t \rangle. \quad (5.7)$$

Esto implica, eligiendo $t = -\tau$,

$$\hat{F}_\tau = e^{-i\hat{H}\tau/\hbar} \hat{F}_0 e^{i\hat{H}\tau/\hbar}, \quad (5.8)$$

$$\hat{\Pi}_0 = \frac{-i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}_0], \quad (5.9)$$

$$\hat{\Pi}_\tau = e^{-i\hat{H}\tau/\hbar} \hat{\Pi}_0 e^{i\hat{H}\tau/\hbar}. \quad (5.10)$$

¹Véase su obtención en el Apéndice Matemático.

$\hat{\Pi}_\tau$ es no-negativo porque $\langle \psi | \hat{F}_\tau | \psi \rangle$ es acumulativo. Mediante un cambio de variable en la Ec.(5.5) se obtiene²

$$e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{T} e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \hat{T} + t. \quad (5.11)$$

De esto, diferenciando, se concluye que \hat{H} y \hat{T} satisfacen la relación de conmutación canónica

$$[\hat{T}, \hat{H}] = i\hbar, \quad (5.12)$$

cuando se calculan valores esperados de vectores en el dominio de \hat{H} .

$\hat{\Pi}_0$ y $\hat{\Pi}_\tau$ no son en general operadores en el espacio de Hilbert, sino únicamente formas bilineales definidas por sus elementos matriciales sobre vectores del dominio de \hat{H} . Por ello una expresión como $\langle E | \hat{\Pi}_0 | E' \rangle$ ha de entenderse como una distribución. Como la diagonal $E = E'$ es de medida cero, no es contradictorio que (5.9) dé cero, mientras en el ejemplo que se verá a continuación obtenemos $1/2\pi\hbar$.

Ejemplo: Para un Hamiltoniano \hat{H} con espectro continuo de autovalores no-degenerados E y autovectores $|E\rangle$ con $\langle E | E' \rangle = \delta(E - E')$ fijamos

$$\langle E | \hat{\Pi}_0 | E' \rangle \equiv \frac{1}{2\pi\hbar}, \quad (5.13)$$

por lo que para este caso

$$\hat{\Pi}_0 = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dE dE' |E\rangle \langle E'|, \quad (5.14)$$

$$\hat{\Pi}_\tau = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dE dE' e^{-i(E-E')\tau/\hbar} |E\rangle \langle E'|. \quad (5.15)$$

La condición de normalización en la Eq.(5.3) se puede comprobar fácilmente. Al correspondiente operador tipo reloj, $-i\hbar\partial_E$,³ que resulta de la Ec. (5.5), se le ha considerado como el “operador de tiempo canónico en la representación de energías” [47, 38], pero observemos que el vector $|E\rangle$ no es único puesto que podemos multiplicarlo por una fase, y tomando $|E\rangle_\varphi \equiv e^{i\varphi(E)} |E\rangle$ en lugar de $|E\rangle$ esto lleva, para distintos φ , a formular múltiples “representaciones de energía”, incluso para un sistema sin degeneración. En esta nueva base el “operador canónico” estaría desplazado por⁴

$$\hbar \int dE \varphi'(E) |E\rangle \langle E| \quad (5.16)$$

²Véase su obtención en el Apéndice Matemático.

³En el caso del tiempo de llegada se sustituye el signo “-” por “+”.

⁴Véase su obtención en el Apéndice Matemático.

con respecto al anterior. Además, la desviación típica esperada, ΔT^2 , para un estado determinado depende de $\varphi(E)$ de modo que, véase el Apéndice 5.8, no se puede elegir un $\varphi(E)$ que haga ΔT mínimo para *todos* los estados. Por lo tanto, en este caso la condición de que ΔT sea mínimo no puede satisfacerse y no conduce a una elección natural única del operador de tiempo sin establecer restricciones adicionales. Un ejemplo de esto se verá más adelante en la Sec. 5.5.

5.2.2. Operadores tiempo de llegada

Los operadores tipo cronómetro y en particular los operadores tiempo-de-llegada y las correspondientes densidades de probabilidad son similares a los operadores reloj (véase como *review* [75, 94]). Físicamente, esperamos que una partícula libre llegue con certeza a una punto de detección predeterminado (incluyendo los tiempos negativos e ignorando el caso con momento lineal nulo cuya medida es cero para un paquete de ondas arbitrario). De manera similar, una partícula libre en 3D llegará a un plano infinitamente extenso. También esperamos que una partícula en un semi-eje con condiciones de contorno reflectantes en el origen y sin ningún potencial adicional, llegue una vez a la frontera y, al menos según los conceptos clásicos, dos veces a cualquier otro punto. En el último caso tiene sentido considerar la primera llegada a un punto dado porque esta debe ser, en principio, observable. Los correspondientes operadores de tiempo de llegada se indican como \hat{T}^A , para el tiempo en sí, y $\hat{\Pi}_t^A$, para la distribución, y cuando los comparamos con los operadores reloj sus propiedades formales son idénticas excepto por el cambio de signo ya mencionado, como se ve en las relaciones de conjugación y en la formulación de la covarianza [117]. Esto significa que, al contrario que en los tiempo de reloj, si el estado de la partícula se desplaza un tiempo t_0 , esta debería llegar un tiempo t_0 antes, y la densidad de probabilidad temporal también debería desplazarse t_0 hacia tiempos anteriores. Estos son, en otras palabras, los tiempos de espera hasta que ocurren los eventos, que dependen del momento en el que el cronómetro se pone a cero, y disminuyen si lo ponemos en marcha un instante posterior. Así, el operador análogo del operador acumulativo de probabilidad de la Ec.(5.7) ahora debe satisfacer

$$\begin{aligned} \langle \psi_0 | \hat{F}_\tau^A | \psi_0 \rangle &= \langle \psi_t | \hat{F}_{\tau-t}^A | \psi_t \rangle \\ \hat{F}_\tau^A &= e^{i\hat{H}\tau/\hbar} \hat{F}_0^A e^{-i\hat{H}\tau/\hbar}. \end{aligned} \tag{5.17}$$

Con $\hat{\Pi}_t^A \equiv d\hat{F}_t^A/dt$ y $\hat{\Pi}_0^A = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{F}_0^A]$ tenemos

$$\hat{T}^A = \int dt t e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\Pi}_0^A e^{-i\hat{H}t/\hbar}, \quad (5.18)$$

$$\hat{\Pi}_t^A = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\Pi}_0^A e^{-i\hat{H}t/\hbar}, \quad (5.19)$$

$$\langle \psi_{t_0} | \hat{T}^A | \psi_{t_0} \rangle = \langle \psi_0 | \hat{T}^A | \psi_0 \rangle - t_0, \quad (5.20)$$

$$\langle \psi_{t_0} | \hat{\Pi}_t^A | \psi_{t_0} \rangle = \langle \psi_0 | \hat{\Pi}_{t+t_0}^A | \psi_0 \rangle. \quad (5.21)$$

Además, el operador debe incorporar la posición donde se observan las llegadas. Para partículas libres que vienen de un lado y llegan a un plano esto se consiguió en la Ref. [52] postulando la invarianza de la densidad de probabilidad bajo una combinación de reflexión espacial e inversión temporal. Es evidente que estas propiedades todavía no especifican un operador único. Por razones físicas, para un observable del tiempo de llegada también exigiremos que la densidad de probabilidad del tiempo de llegada tenga mínima varianza, de forma análoga a lo postulado en la Ref. [52] para partículas libres en un espacio tridimensional. Esto implica que no existe otro observable del tiempo de llegada que se pueda medir con más precisión.

5.3. Forma general de operadores de tiempo covariantes

Comenzamos con operadores tiempo de reloj covariantes asociados con un Hamiltoniano H dado. Por simplicidad, consideramos primero el caso en el que \hat{H} tiene solamente autovalores no-degenerados E , con autovectores generalizados y normalizados $|E\rangle$ tales que

$$\langle E | E' \rangle = \delta(E - E').$$

Obtendremos la forma más general posible de $\hat{\Pi}_0$, que por las Ecs. (5.1 - 5.10), nos conducen al operador densidad de probabilidad covariante y al correspondiente operador de tiempo.

El sencillo ejemplo de la Ec. (5.14) se puede generalizar a

$$\hat{\Pi}_0 = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dE dE' b(E) |E\rangle \langle E' | \overline{b(E')},$$

y se mostrará que

$$\hat{\Pi}_0 = \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_i \int dE dE' b_i(E) |E\rangle\langle E'| \overline{b_i(E')}, \quad (5.22)$$

$$\begin{aligned} \hat{T} &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_i \int dt t \int dE dE' e^{-i(E-E')t/\hbar} \\ &\times b_i(E) |E\rangle\langle E'| \overline{b_i(E')} \end{aligned} \quad (5.23)$$

es la forma más general de $\hat{\Pi}_0$ y \hat{T} , donde las funciones $b_i(E)$ tienen que satisfacer ciertas propiedades con el fin de que la probabilidad total sea 1 y que el segundo momento en la Ec. (5.6) sea finito. De hecho, para un estado $|\psi\rangle$ dado, la probabilidad temporal total es, con $\psi(E) \equiv \langle E|\psi\rangle$,

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \psi | e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{\Pi}_0 e^{i\hat{H}t/\hbar} | \psi \rangle \\ &= \sum_i \int \frac{dt}{2\pi\hbar} \left| \int dE e^{-iEt/\hbar} \overline{\psi(E)} b_i(E) \right|^2 \\ &= \sum_i \int dE dE' \delta(E - E') \overline{\psi(E)} b_i(E) \overline{b_i(E')} \psi(E') \\ &= \sum_i \int dE \overline{\psi(E)} b_i(E) \overline{b_i(E)} \psi(E). \end{aligned} \quad (5.24)$$

Esto es igual a 1 para todos los estados $|\psi\rangle$ solamente si

$$\sum_i b_i(E) \overline{b_i(E)} = 1. \quad (5.25)$$

De igual modo,⁵

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle &= \int dE \overline{\psi(E)} \frac{\hbar}{i} \psi'(E) \\ &+ \int dE |\psi(E)|^2 \frac{\hbar}{i} \sum b_i(E) \overline{b_i(E)}. \end{aligned} \quad (5.26)$$

Hay de observar que $\sum b_i \overline{b_i}$ debe ser imaginario puro (ya que $\langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle$ debe ser real), de la Ec. (5.25), por lo que se anula si b_i es real.

⁵Véase su obtención en el Apéndice Matemático.

El segundo momento es

$$\begin{aligned}
& \int dt t^2 \langle \psi | e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{\Pi}_0 e^{i\hat{H}t/\hbar} | \psi \rangle \\
&= \hbar \sum_i \int \frac{dt}{2\pi} \left| \int dE \partial_E e^{-iEt/\hbar} \overline{\psi(E)} b_i(E) \right|^2 \\
&= \hbar^2 \sum_i \int dE \partial_E \left(\overline{\psi(E)} b_i(E) \right) \partial_E \left(\overline{b_i(E)} \psi(E) \right) \\
&= \hbar^2 \int dE \left\{ |\psi'(E)|^2 + \sum_i |b'_i(E)|^2 |\psi(E)|^2 \right. \\
&\quad \left. + 2 \operatorname{Re} \sum_i \overline{b_i(E)} b'_i(E) \overline{\psi(E)} \psi'(E) \right\}
\end{aligned} \tag{5.27}$$

por la Ec. (5.25). Esta expresión es finita si y solo si las contribuciones del primer y segundo término son finitos; y para que esto se cumpla en el dominio de funciones infinitamente diferenciables $\psi(E)$ que se anulan fuera de un intervalo finito (con soporte compacto en E), se debe tener

$$\sum_i |b'_i(E)|^2 \text{ integrable sobre cualquier intervalo finito.} \tag{5.28}$$

La Ec. (5.22) nos da la forma más general de $\hat{\Pi}_0$ que conduce a un operador de tiempo covariante cuando las funciones b_i satisfacen las Ecs. (5.25), y el segundo momento es finito para estados con $\langle E | \psi \rangle$ de soporte compacto si y solo si se cumple la Eq. (5.28).

Para un $\hat{\Pi}_0$ dado se puede construir las funciones b_i como sigue. Se elige un conjunto maximal de vectores $\{|g_i\rangle\}$ que satisface

$$\langle g_i | \hat{\Pi}_0 | g_j \rangle = \delta_{ij} / 2\pi\hbar. \tag{5.29}$$

Tal conjunto maximal se puede construir fácilmente mediante el procedimiento de ortogonalización estándar de Schmidt. Un posible conjunto $\{b_i\}$ viene dado por

$$b_i(E) = 2\pi\hbar \langle E | \hat{\Pi}_0 | g_i \rangle. \tag{5.30}$$

Entonces la Ec. (5.22) es la realización de una distribución $\hat{\Pi}_0$ dada. Los detalles matemáticos, en particular las propiedades de regularidad, se presentan en [42]. Hay que decir que las funciones b_i utilizadas en la descomposición de $\hat{\Pi}_0$, en la Ec.(5.22), no son únicas.

Para autovalores degenerados de \hat{H} primero consideramos el caso donde la degeneración se denota por un número discreto entero, α , tal que

$$\langle E, \alpha | E', \alpha' \rangle = \delta_{\alpha\alpha'} \delta(E - E'). \quad (5.31)$$

Para mayor simplicidad, supondremos que la degeneración es la misma para todo E . Entonces las Ecs. (5.22 - 5.28) se generalizan como

$$\hat{\Pi}_0 = \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_i \int dE dE' \sum_{\alpha\alpha'} b_i(E, \alpha) |E, \alpha\rangle \langle E', \alpha'| \overline{b_i(E', \alpha')}, \quad (5.32)$$

$$\sum_i b_i(E, \alpha) \overline{b_i(E, \alpha')} = \delta_{\alpha\alpha'}, \quad (5.33)$$

$$\text{segundo momento} = \hbar^2 \int dE \left| \partial_E \sum_{\alpha} \overline{b_i(E, \alpha)} \psi(E, \alpha) \right|^2, \quad (5.34)$$

$$\sum_i |b'_i(E, \alpha)|^2 \text{ integrable sobre cualquier intervalo finito} \quad (5.35)$$

para cada α , donde $\psi(E, \alpha) \equiv \langle E, \alpha | \psi \rangle$ y $b_i(E, \alpha) = 2\pi\hbar \langle E, \alpha | \hat{\Pi}_0 | g_i \rangle$. De nuevo la Ec. (5.32) nos da la forma más general posible de $\hat{\Pi}_0$ que conduce a un operador de tiempo covariante a través de las Ecs. (5.1-5.10). El caso de que el parámetro de degeneración sea continuo podemos reducirlo al caso discreto.

Estos resultados se generalizan sin dificultad a tiempos de llegada con densidades de probabilidad normalizadas.

5.4. Unicidad del operador de tiempo: inversión temporal, simetrías y varianza mínima

Como acabamos de ver en la sección previa, hay muchos operadores de tiempo covariantes tipo-reloj. Para seleccionar un único operador, es necesario añadir condiciones físicas. Lo natural es requerir que la varianza ΔT , o la desviación típica ΔT^2 , sea mínima para todos los estados con segundo momento. Físicamente, esto significa que ningún observable de tiempo se puede medir con más precisión.

Sin embargo, la condición de varianza mínima aislada no hace que \hat{T} sea único, incluso cuando el espectro de \hat{H} es no degenerado, ya que en general puede que no sea posible satisfacer esta condición para todos los estados

con segundo momento. De hecho, como se muestra en el Apéndice 5.8, no se pueden elegir las funciones b_i de manera que cumplan las Ecs. (5.25) y (5.28) y que además consigan que ΔT sea mínima para *todos* los estados $|\psi\rangle$. Sin embargo, si además se restringe el conjunto de posibles funciones b_i por requerimientos de simetría, sí que puede encontrarse un operador único, como ahora discutiremos.

El operador de inversión temporal, $\hat{\Theta}$, es un operador anti-unitario (en representación de coordenadas $\hat{\Theta}c|x\rangle = \bar{c}|x\rangle$). Si la dinámica es invariante frente a inversión temporal, lo natural es demandar que

$$\hat{\Theta} \hat{T} \hat{\Theta} = -\hat{T}, \quad (5.36)$$

e igualmente para la densidad de probabilidad. Por la Ec. (5.9) esto implica

$$\hat{\Theta} \hat{\Pi}_0 \hat{\Theta} = \hat{\Pi}_0. \quad (5.37)$$

Se mostrará ahora, para el caso autovalores no-degenerados, que la invarianza frente a la inversión temporal del Hamiltoniano \hat{H} y de $\hat{\Pi}_0$, junto con la minimización de ΔT implica la unicidad de \hat{T} y $\hat{\Pi}_t$. Para cada autovalor E de \hat{H} se puede elegir un autovector invariante de $\hat{\Theta}$, que llamaremos $|E_\Theta\rangle$, tal que

$$\hat{\Theta}|E_\Theta\rangle = |E_\Theta\rangle. \quad (5.38)$$

Esto significa una elección específica del factor de fase y de una función real en el espacio de posiciones. La Ec. (5.37) nos dice que se puede escribir $\hat{\Pi}_0 = 1/2(\hat{\Pi}_0 + \hat{\Theta} \hat{\Pi}_0 \hat{\Theta})$, y entonces la forma general de $\hat{\Pi}_0$ en la Ec. (5.22) implica que se puede elegir $b_i(E)$ real. Entonces, de las Ecs. (5.26) y (5.27), se encuentra

$$\langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle = \int dE \overline{\psi(E)} \frac{\hbar}{i} \psi'(E), \quad (5.39)$$

$$\begin{aligned} \text{segundo momento} &= \hbar^2 \int dE |\psi'(E)|^2 \\ &+ \hbar^2 \sum_i \int dE |\psi|^2 |b'_i(E)|^2. \end{aligned} \quad (5.40)$$

De aquí, una ΔT mínima en este caso significa que el segundo momento es mínimo, y esto último ocurre solamente si $b'_i(E) \equiv 0$, es decir,

$$b_i(E) \equiv c_i, \quad \sum c_i^2 = 1,$$

por la Ec. (5.25). Insertando esto en la Ec. (5.22) se ve que las funciones b_i

se pueden reemplazar por una única función $b(E) \equiv 1$. Así se obtiene

$$\begin{aligned}\hat{\Pi}_0 &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dE dE' |E_\Theta\rangle\langle E'_\Theta|, \\ \hat{\Pi}_t &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dE dE' e^{-i(E-E')t/\hbar} |E_\Theta\rangle\langle E'_\Theta|, \\ \hat{T} &= \int dt t \hat{\Pi}_t,\end{aligned}\tag{5.41}$$

con $|E_\Theta\rangle$ invariante bajo una reflexión del tiempo. Los autovectores (no-ortogonales), $|\tau\rangle$, de \hat{T} con autovalores τ vienen dados por

$$|\tau\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^\infty dE e^{-iE\tau/\hbar} |E_\Theta\rangle,\tag{5.42}$$

y el operador \hat{T} se puede expresar como

$$\hat{T} = \int_{-\infty}^\infty d\tau \tau |\tau\rangle\langle\tau|.\tag{5.43}$$

Por lo tanto la unicidad en el caso no-degenerado es posible si se cumplen tanto la invarianza bajo la inversión temporal como la minimización de ΔT .

En el caso de autovalores degenerados se necesitan condiciones adicionales para obtener la unicidad, como se discute en [42]. Aquí simplemente expon-dremos algunos resultados. Para un potencial invariante bajo reflexión en una dimensión, el operador tiempo-reloj es único y se puede determinar explícita-mente si, además de ser covariante bajo inversión temporal y tener varian-za mínima, también se exige que sea invariante bajo reflexiones espaciales. En un potencial invariante bajo rotaciones en tres dimensiones, el operador de tiempo es único y puede ser determinado explícitamente si, además de la covarianza bajo inversión temporal y minimizar la varianza, también se demanda la invarianza bajo rotaciones y reflexiones $x_1 \rightarrow -x_1$. Resultados análogos son válidos para los operadores de tiempo de llegada. En particular, los resultados de la Ref. [52] se generalizan en [42].

5.5. Aplicación a los tiempos de llegada

Evidentemente las técnicas de las secciones previas se pueden aplicar de forma completamente análoga al estudio de los operadores de tiempo de llegada. Para ilustrar esto consideramos a continuación el movimiento de una partícula en un semi-espacio $x \geq 0$, sin ningún potencial adicional, y estudiemos su tiempo de llegada al origen y a otro punto cualquiera.

En el caso clásico una partícula libre que incide con energía E , se refleja en el origen y vuelve hacia el infinito. Por ello, en cada punto $a \neq 0$, existen un primer y un segundo tiempo de llegada a los que denominamos t_1^a y t_2^a . Para la trayectoria invertida temporalmente el primer tiempo de llegada al punto a es $t_{\theta,1}^a = -t_2^a$ y el segundo tiempo de llegada $t_{\theta,2}^a = -t_1^a$, como se puede calcular fácilmente. En el origen, $a = 0$, solo hay un tiempo de llegada y

$$t_\theta^0 = -t^0. \quad (5.44)$$

El correspondiente operador de tiempo-de-llegada para las llegadas al origen se escribe como \hat{T}_f^A . Es natural exigir una relación análoga a la Ec. (5.44),

$$\hat{\Theta} \hat{T}_f^A \hat{\Theta} = -\hat{T}_f^A, \quad (5.45)$$

y la invarianza frente a inversión temporal de $\hat{\Pi}_{f,0}^A$, donde $\hat{\Pi}_{f,t}^A$ es el operador de densidad de probabilidad asociado.

Si $a \neq 0$, una partícula libre en el semi-espacio positivo que viene desde el infinito con velocidad $|v|$, primero llega en el tiempo t_1^a al punto a , y al origen después de un tiempo t^0 ,

$$t_1^a = t^0 - a/|v|. \quad (5.46)$$

Si \hat{T}_1^A denota el correspondiente operador de tiempo para el primer tiempo de llegada al punto a podemos exigir

$$\hat{T}_1^A = \hat{T}_f^A - a/|\hat{v}|, \quad (5.47)$$

donde $|\hat{v}| = \sqrt{2\hat{H}/m}$ es el operador velocidad.

5.5.1. Partícula libre en el semi-espacio

Primero consideramos llegadas al origen en el movimiento libre en un semi-espacio $x \geq 0$, con condiciones de contorno reflectantes en $x = 0$. Se pueden etiquetar las autofunciones por su energía $E = k^2\hbar^2/(2m)$. Las autofunciones reales de energía E , por lo tanto invariantes bajo el operador $\hat{\Theta}$, que se anulan en el origen son⁶

$$\langle r|E_f\rangle = \frac{i}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2\pi k}} (e^{-ikr} - e^{ikr}), \quad (5.48)$$

donde los subíndices f en $|E_f\rangle$ se refieren al Hamiltoniano libre y hemos escrito r para indicar $r \equiv x \geq 0$. Estas autofunciones están normalizadas como $\langle E_f|E'_f\rangle = \delta(E - E')$ sobre un semi-espacio.

⁶Véase su obtención en el Apéndice Matemático.

El operador densidad de probabilidad de llegadas al origen es invariante bajo inversiones temporales

$$\hat{\Theta} \hat{\Pi}_{f,0}^A \hat{\Theta} = \hat{\Pi}_{f,0}^A. \quad (5.49)$$

Por los resultados de la última sección, los operadores $\hat{\Pi}_{f,t}^A$ y \hat{T}_f^A son únicos si imponemos las condiciones de invarianza bajo inversiones temporales y mínima varianza. De la Ec. (5.41) se obtiene, haciendo el cambio $t \rightarrow -t$ y reemplazando $|E_\Theta\rangle$ por $|E_f\rangle$,

$$\begin{aligned} \hat{\Pi}_{f,t}^A &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dE dE' e^{i(E-E')t/\hbar} |E_f\rangle \langle E'_f|, \\ \hat{T}_f^A &= \int dt t \hat{\Pi}_{f,t}^0. \end{aligned} \quad (5.50)$$

Este operador de tiempo de llegada es justo el negativo del operador de tiempo-reloj de la Ec. (5.41), con los correspondientes cambios en las Ecs. (5.42) y (5.43).

El que la función de onda se anule en $r = 0$ no es obstáculo para definir estos operadores de forma que tengan significado físico. Es una situación similar a la que encontramos para funciones de onda antisimétricas en el espacio (eje x) completo. En [44] se mostró que la distribución ideal del tiempo de llegada se obtiene, mediante un proceso de paso al límite, a partir de un modelo de medida operacional basado en un detector débil y estrecho.

Ahora volvamos a las primeras llegadas a un punto $a \neq 0$. Utilizando la Ec. (5.12), un cálculo simple muestra que

$$e^{iam|\hat{v}|/\hbar} \hat{T}_f^A e^{-iam|\hat{v}|/\hbar} = \hat{T}_f^A - a/|\hat{v}|. \quad (5.51)$$

Como el lado derecho de esta ecuación, por la Ec. (5.47), es igual a \hat{T}_1^A , esto implica una relación análoga para el operador densidad de probabilidad, $\hat{\Pi}_{1,t}^A$, correspondiente a \hat{T}_1^A ,

$$\hat{\Pi}_{1,t}^A = e^{iam|\hat{v}|/\hbar} \hat{\Pi}_{f,t}^A e^{-iam|\hat{v}|/\hbar}. \quad (5.52)$$

Usando la Ec. (5.50) podemos escribir

$$\hat{\Pi}_{1,t}^A = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dE dE' e^{i(E-E')t/\hbar} e^{i(k-k')a} |E_f\rangle \langle E'_f|, \quad (5.53)$$

que nos da la expresión explícita del operador densidad de probabilidad de primera llegada al punto a de una partícula libre sobre el semi-espacio positivo. Cuando $a \rightarrow 0$ se recupera la Ec. (5.50).

5.5.2. Estados asintóticos y tiempo de retardo de Smith

Ahora vamos a aplicar los resultados de la partícula libre de la Ec. (5.50) a los estados asintóticos de una partícula en un potencial sobre un semi-espacio cuyo Hamiltoniano no tiene estados ligados y al cual se le puede aplicar la teoría de colisiones. Aunque para una energía E , el autoestado es único excepto en una fase, existen autoestados físicamente relevantes $|E_{\pm}\rangle$ correspondientes a ondas planas entrantes (+) y salientes (-), $|E_{-}\rangle = \hat{\Theta}|E_{+}\rangle$, así como estados invariantes con respecto a Θ , $|E_{\Theta}\rangle$. Usando el desfase de colisión $\delta = \delta(E)$ podemos escribir

$$\begin{aligned}\langle r|E_{+}\rangle &\sim \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{k\pi}} \frac{i}{2} (e^{-ikr} - e^{2i\delta} e^{ikr}), \\ \langle r|E_{-}\rangle &= \overline{\langle r|E_{+}\rangle} = e^{-2i\delta} \langle r|E_{+}\rangle, \\ \langle r|E_{\Theta}\rangle &= e^{-i\delta} \langle r|E_{+}\rangle.\end{aligned}\quad (5.54)$$

Los operadores de Møller $\hat{\Omega}_{\pm}$ satisfacen

$$\begin{aligned}\hat{\Omega}_{\pm} &\equiv \lim_{t \rightarrow \mp\infty} e^{i\hat{H}t/\hbar} e^{-i\hat{H}_f t/\hbar} = \int_0^{\infty} dE |E_{\pm}\rangle \langle E_f|, \\ |E_{\pm}\rangle &= \hat{\Omega}_{\pm} |E_f\rangle.\end{aligned}\quad (5.55)$$

En el movimiento libre, los estados asintóticos $|\psi_{in}\rangle$ y $|\psi_{out}\rangle$ son mapeados por los operadores $\hat{\Omega}_{\pm}$ hacia el estado real $|\psi\rangle$,

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \hat{\Omega}_{\pm} |\psi_{out}\rangle \\ |\psi_{out}\rangle &= \hat{S} |\psi_{in}\rangle\end{aligned}\quad (5.56)$$

donde $\hat{S} = \hat{\Omega}_{-}^{\dagger} \hat{\Omega}_{+}$ es el operador S . Obsérvese que, por la Ec. (5.54),

$$\hat{S} = \int_0^{\infty} dE |E_f\rangle e^{2i\delta} \langle E_f|, \quad (5.57)$$

de forma que $e^{2i\delta}$ es el autovalor de \hat{S} para el estado $|E_f\rangle$.

Resulta útil también introducir el operador

$$\hat{\Omega}_{\Theta} \equiv \int_0^{\infty} dE |E_{\Theta}\rangle \langle E_f| \quad (5.58)$$

y definir los operadores $\hat{T}_{\pm, \Theta}^A$ como

$$\hat{T}_{\pm, \Theta}^A \equiv \hat{\Omega}_{\pm, \Theta} \hat{T}_f^0 \hat{\Omega}_{\pm, \Theta}^{\dagger} = \int dt t \int dE dE' e^{i(E-E')t/\hbar} |E_{\pm, \Theta}\rangle \langle E'_{\pm, \Theta}|. \quad (5.59)$$

La última igualdad demuestra que $-\hat{T}_{\pm,\Theta}^A$ son operadores de tiempo de reloj para la partícula en un potencial. Como los estados $|E_{\pm,\Theta}\rangle$ solamente difieren en una fase, el mismo cálculo que conduce a la Ec. (5.16) produce

$$\hat{T}_{\pm}^A = \hat{T}_{\Theta}^A \mp \hbar \int dE \frac{\partial \delta}{\partial E} |E_{\Theta}\rangle \langle E_{\Theta}|. \quad (5.60)$$

A partir de la Ec. (5.56) se demuestra que los valores esperados de \hat{T}_{+}^A , \hat{T}_{-}^A y \hat{T}_{Θ}^A se pueden interpretar en función de los estados asintóticos y del operador del tiempo de llegada del movimiento libre \hat{T}_f^A ,

$$\langle \psi | \hat{T}_{+,-,\Theta}^A | \psi \rangle = \langle \psi_{in,out,io} | \hat{T}_f^A | \psi_{in,out,io} \rangle, \quad (5.61)$$

donde el estado con movimiento libre $|\psi_{io}\rangle$ se define por

$$|\psi_{io}\rangle \equiv \hat{S}^{1/2} |\psi_{in}\rangle, \quad (5.62)$$

y se le puede considerar como una interpolación entre $|\psi_{in}\rangle$ y $|\psi_{out}\rangle = \hat{S} |\psi_{in}\rangle$. Utilizando la Ec. (5.58) se puede escribir

$$|\psi_{io}\rangle = \Omega_{\Theta}^{\dagger} |\psi\rangle. \quad (5.63)$$

Tomando los valores esperados de la Ec. (5.60) con $|\psi\rangle$ y usando las Ecs. (5.61) y (5.55), junto con el hecho de que todos los $|E_{\pm,\Theta}\rangle \langle E_{\pm,\Theta}|$ coinciden, ya que las fases se cancelan, llegamos al resultado

$$\langle \psi_{out} | \hat{T}_f^A | \psi_{out} \rangle = \langle \psi_{io} | \hat{T}_f^A | \psi_{io} \rangle \mp \hbar \int dE \frac{\partial \delta}{\partial E} |\langle E_f | \psi_{in} \rangle|^2. \quad (5.64)$$

Vemos que el tiempo de llegada esperado para el estado interpolado $|\psi_{io}\rangle$ queda entre los de las ondas entrante y saliente. De la Ec. (5.64),

$$\langle \psi_{out} | \hat{T}_f^A | \psi_{out} \rangle - \langle \psi_{in} | \hat{T}_f^A | \psi_{in} \rangle = 2\hbar \int dE \frac{\partial \delta}{\partial E} |\langle E_f | \psi_{in} \rangle|^2. \quad (5.65)$$

El lado derecho de la última ecuación es el tiempo de retardo de Smith [101] y muestra que es el tiempo que se retrasa la onda saliente respecto a la onda entrante. Puede verse un ejemplo en las Figs. 5.1 y 5.2.

Esto extiende la utilidad del concepto de tiempo de retardo, normalmente restringido a la llegada de ondas a grandes distancias de la región de interacción, al tiempo de llegada de estados asintóticos al origen. El tiempo de retardo ha sido relacionado a mediciones débiles, vease [104] y [106], valdría la pena examinar la relación entre ese enfoque y el presente trabajo.

Inversión temporal: El comportamiento de T_{\pm}^A con respecto a la inversión temporal viene dado por $\hat{\Theta}$,

$$\hat{\Theta} \hat{T}_{\pm}^A \hat{\Theta} = -\hat{T}_{\mp}^A \quad (5.66)$$

mientras que \hat{T}_{Θ}^A simplemente cambia de signo. Los operadores \hat{T}_{\pm}^A no cambian simplemente de signo, pero su comportamiento en la Ec. (5.66) (cambiando el signo e intercambiando los operadores) tiene un sentido físico perfectamente válido: la trayectoria invertida temporalmente de una trayectoria que se mueve hacia el origen está en la misma posición pero se aleja del origen. Si la trayectoria original incidente requiere de un cierto tiempo τ para llegar al origen en movimiento libre, la trayectoria invertida es saliente, con lo que salió del origen en $-\tau$. En resumen, estos operadores dan información acerca de la dinámica del movimiento libre de las asíntotas entrante y saliente del estado, y los tiempos de retardo de colisión [60, 5]. Así, aunque el operador \hat{T}_{Θ}^A es único cuando se aplica el criterio de la sección previa, no reemplaza a \hat{T}_{\pm}^A ya que no describe la misma física, y los tres operadores tienen su propio y legítimo sentido.

5.6. Aplicación a los operadores de Lyapunov en Mecánica Cuántica

En la Ref. [108] se denomina operador de Lyapunov \hat{L} a aquel que, para cualquier estado normalizado $|\psi\rangle$ y $|\psi_t\rangle \equiv e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi\rangle$, su valor esperado $\langle\psi_t|\hat{L}|\psi_t\rangle$ es monótono decreciente hacia 0 cuando $t \rightarrow \infty$ y tiende a 1 cuando $t \rightarrow -\infty$. Strauss, en la Ref. [108] considera el caso de un Hamiltoniano \hat{H} cuyo espectro de autovalores es continuo de cero a infinito, y tiene un parámetro de degeneración j . El operador de Lyapunov que allí se sugiere se puede expresar como

$$\hat{L}_S = \frac{i}{2\pi\hbar} \sum_j \int_0^\infty dE \int_0^\infty dE' \frac{|E, j\rangle\langle E', j|}{E - E' + i\varepsilon}. \quad (5.67)$$

De manera más general, se puede considerar que un operador ligado \hat{L} es un operador de Lyapunov si $\langle\psi_t|\hat{L}|\psi_t\rangle$ es monótono decreciente, sin especificar límites. Sin embargo, se mostrará más adelante, después de la Ec. (5.68), que, sin pérdida de generalidad, siempre se puede suponer el comportamiento anterior de 1 a 0 cuando t va desde $-\infty$ a $+\infty$.

La noción anterior no corresponde a los funcionales de Lyapunov usados en la Ref. [100] para definir la reversibilidad y la flecha del tiempo, ya

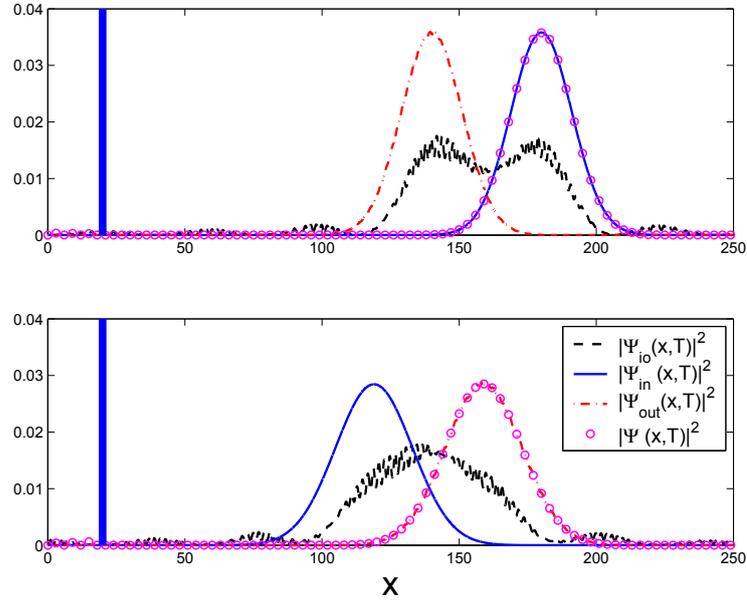


Figura 5.1: Densidades de probabilidad antes ($t = 0$) y después de la colisión ($t = 190$) con una barrera delta. Unidades adimensionales con $m = \hbar = 1$. El paquete de onda inicial es $\psi(k) = N[1 - \exp(-\beta k^2)] \exp[-(k - k_0)^2 / (4\Delta_k^2)] \exp(-ikx_0)\theta(k)$, donde N es la constante de normalización y θ (en este caso) es la función escalón de Heaviside; número de onda inicial $k_0 = -\pi/2$, $\Delta_k = 0,045$, $\beta = 1/2$; $V = 20\delta(x - 20)$; centro inicial del paquete de ondas en $x_0 = 180$. El potencial delta es lo suficientemente opaco para que el paquete saliente esté adelantado respecto al estado entrante.

que allí se supuso la invarianza bajo una inversión temporal del funcional. Se mostrará más adelante que, si el Hamiltoniano es invariante frente a la inversión temporal, no existen operadores de Lyapunov que sean invariantes frente a la inversión temporal.

Es claro que las propiedades mencionadas no definen un único operador \hat{L} en la Ec. (5.67). Por ejemplo, se pueden introducir diferentes fases y tener todavía un operador de Lyapunov. En esta sección vamos a determinar la forma más general de \hat{L} para el caso de un Hamiltoniano \hat{H} con espectro puramente (absolutamente) continuo y daremos las condiciones bajo las cuales se hace único. También se verá que para cada \hat{L} existe un operador de tiempo covariante asociado \hat{T}_L .

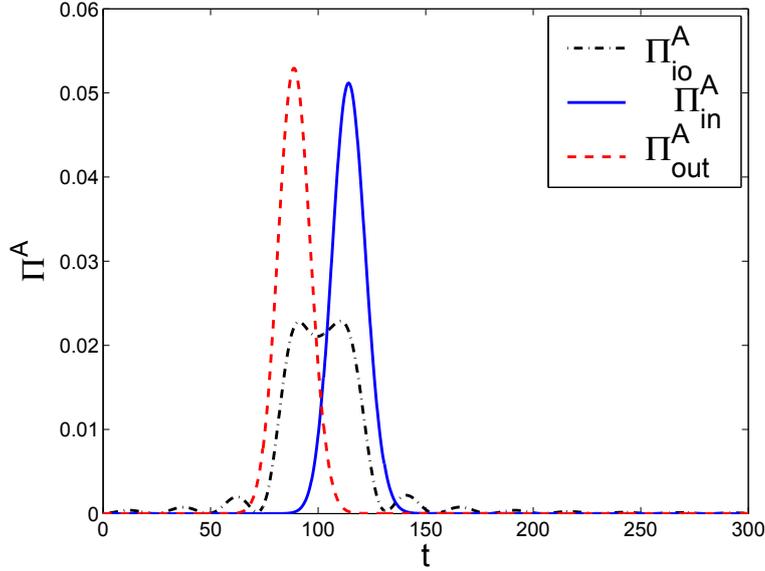


Figura 5.2: Distribuciones del tiempo de llegada a $x = 0$ correspondientes a la figura anterior.

Para mostrar que se puede suponer el comportamiento límite anteriormente mencionado escribimos, para un operador general de Lyapunov \hat{L} dado,

$$\hat{L}_t \equiv e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{L} e^{i\hat{H}t/\hbar}, \quad (5.68)$$

tal que \hat{L}_t aumenta monótonamente (debido a la disminución monótona de $\langle \psi_t | \hat{L} | \psi_t \rangle$). De la acotación de \hat{L} y de la condición de monotonía se deduce que $\hat{L}_{\pm\infty}$ existe como límite de operadores en el sentido débil, es decir, para valores esperados. Además, $\hat{L}_{\pm\infty}$ commuta con $e^{-i\hat{H}t/\hbar}$, y por lo tanto $\hat{L}' \equiv \hat{L} - \hat{L}_{-\infty}$ también es un operador de Lyapunov, con $\hat{L}'_t \geq 0$. Entonces $\hat{L}'' \equiv \hat{L}'^{-1/2} \hat{L}' \hat{L}'^{-1/2}$ es un operador de Lyapunov que satisface $\hat{L}''_{-\infty} = 0$ y $\hat{L}''_{\infty} = 1$ tal que $\langle \psi_t | \hat{L}'' | \psi_t \rangle$ es monótona decreciente desde 1 a 0, como queríamos demostrar.

Para determinar la forma general de \hat{L} con tal comportamiento límite cuando $t \rightarrow \pm\infty$, observemos primero que por ser monótono

$$\hat{\Pi}_t^L \equiv \frac{d}{dt} \hat{L}_t = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \frac{-i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}] e^{i\hat{H}t/\hbar} \geq 0, \quad (5.69)$$

esto es, los valores esperados de \hat{L}_t son no-negativos para cualquier t , en particular

$$\hat{\Pi}_0^L = \frac{-i}{\hbar} [\hat{H}, L] \geq 0, \quad (5.70)$$

donde el conmutador tiene que entenderse otra vez en el sentido débil a través de los elementos de la matriz y donde $\hat{\Pi}_0^L$ en general no es un operador sino únicamente una forma bilineal, como en el Ec. (5.9). A partir de la Ec. (5.69) y de $\hat{L}_{-\infty} = 0$ se obtiene

$$\hat{L} = \int_{-\infty}^0 dt e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{\Pi}_0^L e^{i\hat{H}t/\hbar}. \quad (5.71)$$

De la Ec. (5.69) se ve que

$$\Pi_L(t; \psi) \equiv \langle \psi | \hat{\Pi}_t^L | \psi \rangle \geq 0 \quad (5.72)$$

es una densidad no-negativa que integrada para cada estado normalizado resulta igual a 1, por lo que puede ser considerada como una densidad de probabilidad y por lo tanto \hat{L}_t se comporta como el operador de probabilidad acumulada \hat{F}_τ en la Ec. (5.1). Por consiguiente,

$$\hat{T}_L \equiv \int dt t e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{\Pi}_0^L e^{i\hat{H}t/\hbar} \quad (5.73)$$

es análogo al operador de tiempo \hat{T} de la Ec. (5.5). Alternativamente, $1 - \hat{L}_{-t}$ se comporta como el operador de probabilidad acumulativa de llegada \hat{F}_t^A de la Ec. (5.17).

Ejemplo: Sea $\hat{\Pi}_0^L$ dado por la Ec. (5.14). Entonces, por la Ec. (5.71), \hat{L} viene dado por

$$\hat{L} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^0 dt \int dE dE' e^{-i(E-E')t/\hbar} |E\rangle \langle E'|, \quad (5.74)$$

que está de acuerdo con \hat{L}_S en la Ec. (5.67) para el caso no-degenerado.

Para el movimiento libre sobre un semi-espacio, con $|E\rangle = |E_f\rangle$ a partir de la Ec. (5.48), la propiedad de Lyapunov de este ejemplo simplemente refleja la acumulación monótona de llegadas al origen, puesto que un cambio en la variable de integración nos da

$$\langle \psi_t | 1 - \hat{L} | \psi_t \rangle = \int_{-\infty}^t dt' \langle \psi | \hat{\Pi}_{f,t'}^0 | \psi \rangle. \quad (5.75)$$

Colocando un potencial en el semi-espacio y tomando $|E\rangle = |E_\pm\rangle$ de la sección previa se obtiene la acumulación de llegadas de los paquetes $|\psi_{in}\rangle$ y

$|\psi_{out}\rangle$ moviéndose libremente, y para $|E\rangle = |E_\Theta\rangle$ la correspondiente acumulación de llegadas del paquete $|\psi_{io}\rangle$.

La forma más general de \hat{L} se obtiene a partir de la forma más general de $\hat{\Pi}_0^L$ que viene dada por las Ecs. (5.32) y (5.33). Si se conoce $\hat{\Pi}_0^L$, entonces \hat{L} viene dada por la Ec. (5.71), y de este modo se obtiene la forma más general posible del operador de Lyapunov \hat{L} con el anterior comportamiento en los límites $t \rightarrow \pm\infty$. La unicidad de \hat{L} para Hamiltonianos particulares se puede lograr, como en las Secciones 5.4 y 5.5, exigiendo la invarianza bajo inversión temporal de \hat{T}_l , simetrías especiales y mínima varianza de ΔT_L .

Finalmente mostramos que para un Hamiltoniano invariante bajo inversión temporal no existe un operador de Lyapunov no trivial invariante bajo inversión temporal. De hecho, si $\hat{\Theta}\hat{H}\hat{\Theta} = \hat{H}$ y $\hat{\Theta}\hat{L}\hat{\Theta} = \hat{L}$ entonces se obtiene, para el estado inicial $\hat{\Theta}|\psi\rangle \equiv |(\hat{\Theta}\psi)\rangle$,

$$\langle(\hat{\Theta}\psi)_t|\hat{L}|(\hat{\Theta}\psi)_t\rangle = \langle\psi_{-t}|\hat{L}|\psi_{-t}\rangle \quad (5.76)$$

por la condición de anti-unitario del operador $\hat{\Theta}$. Ahora, para valores de t crecientes, la expresión del lado izquierdo decrece mientras que la del lado derecho aumenta. Esto solo es posible si ambos lados son constantes en el instante t . Se puede concluir de la Ec. (5.70) que ambos $\hat{\Pi}_0^L$ y $\hat{\Theta}\hat{\Pi}_0^L\hat{\Theta} = -\hat{\Pi}_0^L$ son operadores positivos, lo cual solo es posible si $\hat{\Pi}_0^L = 0$. Esto significa que \hat{L} conmuta con \hat{H} , el cual también conduce a que ambos lados de la Ec. (5.76) sean constantes.

5.7. Discusión y perspectivas

Hemos deducido la forma más general posible de un operador de tiempo covariante normalizado. El resultado es importante para establecer un marco flexible donde se puedan imponer condiciones físicas. Ejemplos de aplicaciones son los operadores de tiempo de reloj, operadores de tiempo de llegada, y los operadores de Lyapunov.

Experimentalmente, varias cuestiones interesantes acerca de los relojes cuánticos y de las medidas de los tiempos de llegada permanecen sin resolver. Por ejemplo, los relojes cuánticos son, básicamente, sistemas cuánticos con un observable que evoluciona linealmente en el tiempo. Para evaluar la posibilidad de competir con los relojes atómicos actuales [80], los observables se deben realizar en un sistema específico. Hemos descrito un observable ideal (imponiendo la anti-simetría respecto a la inversión temporal y que la varianza sea mínima) y ahora queda pendiente la realización operacional. Se ha efectuado ya un análisis similar para la distribución ideal del tiempo de llegada de Kijowski en términos de la realización operacional en óptica cuántica

con átomos fríos [94]). De hecho, los átomos fríos y la óptica cuántica ofrecen ejemplos de tiempos tipo evento (distintos a las llegadas), tales como los tiempos de salto, de excitación, y de escape, que admiten un tratamiento en términos de observables covariantes. Modelizando y entendiendo estas cantidades y sus respectivas estadísticas podemos mejorar nuestra habilidad para manipular u optimizar procesos dinámicos.

En el lado teórico, una pregunta abierta es cómo adaptar el marco propuesto, posiblemente en combinación con investigaciones previas [6, 60, 5, 44, 29, 30, 31], a los tiempos de llegada en el caso de una partícula en movimiento sujeto a la acción de un potencial.

Finalmente, hemos mostrado que los operadores de Lyapunov surgen de manera natural de los observables de tiempo covariantes. Asociados a los operadores de tiempo de llegada, estos consideran, para estados asintóticamente libres, la acumulación monótona de llegadas desde el pasado infinito independientemente de cuál sea el estado elegido. Hay que aclarar que el término “pasado infinito” aquí es una entidad idealizada ya que se supone que la onda ha evolucionado desde siempre, ignorando el hecho de que en la práctica el estado ha tenido que ser preparado en algún instante concreto. En otras palabras, el operador de Lyapunov no depende del instante de preparación del estado, y cuando lo aplicamos al estado toma en cuenta su pasado idealizado (no necesariamente real), con independencia de que ese pasado se haya materializado total o parcialmente.

Al final de la última sección también se muestra que en teorías con un Hamiltoniano invariante con respecto a inversiones temporales no existen operadores de Lyapunov invariantes. En la Ref. [100] se argumentó que para caracterizar un sistema como irreversible y distinguir una dirección del tiempo, el funcional de Lyapunov debería ser invariante bajo inversión temporal. Por lo tanto, si se acepta la premisa de la Ref. [100] entonces, a partir de nuestros resultados, la mecánica cuántica para un número finito de partículas no es irreversible y no muestra una flecha del tiempo si el Hamiltoniano es invariante bajo inversiones del tiempo.

5.8. Apéndice: Varianza mínima y no-unicidad del operador de tiempo

Vamos a mostrar, para el caso de un Hamiltoniano \hat{H} de espectro no-degenerado, que la varianza mínima únicamente no implica la unicidad de \hat{T} . Primero consideraremos un estado $|\psi\rangle$ tal que, eligiendo una base de autovectores generalizada, $\langle E|\psi\rangle \equiv \psi(E)$ es real. Entonces el primer término

de la parte derecha de la igualdad de la Ec. (5.26) es la integral del producto de una función y su derivada total, entonces al ser el integrando una función impar su integral se anula, lo mismo ocurre en el tercer término al lado derecho de la igualdad de la Ec. (5.27), por la Ec (5.25). Así

$$\Delta T^2 = \int dE |\psi'|^2 + \sum_i \int dE |b'_i|^2 |\psi|^2 - \left(\int dE |\psi|^2 i \sum_i b_i \bar{b}'_i \right)^2. \quad (5.77)$$

Minimizar ΔT^2 implica que debemos hacer lo más grande posible el último término de la Ec. (5.77). Por la desigualdad de Schwarz, este se puede estimar como

$$\left| \sum_i \int dE |\psi|^2 b_i \bar{b}'_i \right|^2 \leq \sum_i \int dE |\psi|^2 |b_i|^2 \cdot \sum_i \int dE |\psi|^2 |b'_i|^2, \quad (5.78)$$

donde la primera suma de la parte derecha de la igualdad es 1 y la igualdad se cumple solo si $b'_i(E)$ y $b_i(E)$ son proporcionales,

$$b'_i(E) = \gamma b_i(E) \quad , \quad \gamma = \text{constante}, \quad (5.79)$$

lo que implica

$$\sum b_i \bar{b}'_i = \bar{\gamma} \sum b_i \bar{b}_i = \bar{\gamma}. \quad (5.80)$$

Como el lado izquierdo de esta última igualdad es imaginario puro, de la Ec. (5.25), esto implica $\gamma = i\lambda$ con λ real. Así, para $\psi(E)$ real,

$$\Delta T^2 \geq \int dE |\psi'(E)|^2, \quad (5.81)$$

la igualdad se cumple únicamente si en la Ec. (5.79) hacemos $\gamma = i\lambda$, λ real, es decir, si y solo si

$$\begin{aligned} b_i(E) &= c_i e^{i\lambda E}, \quad \lambda \text{ real}, \\ \sum_i b_i(E) \bar{b}_i(E) &= \sum_i |c_i|^2 = 1. \end{aligned} \quad (5.82)$$

Estas funciones proporcionan el mismo operador de tiempo y densidad que la función única

$$b(E) = e^{i\lambda E}. \quad (5.83)$$

Con esta elección ΔT^2 es mínimo para $\psi(E)$ real.

Para un estado tal que $e^{i\varphi(E)}\psi(E)$, con $\psi(E)$ y $\varphi(E)$ reales, siguiendo el mismo argumento, al reemplazar b_i por $e^{-i\varphi(E)} b_i$, se hace mínima la varianza si y solo si

$$b_i(E) = c_i e^{i(\lambda E - \varphi(E))}. \quad (5.84)$$

Esto difiere de la Ec. (5.82), como lo hace la expresión análoga $e^{i[\lambda E - \varphi(E)]}$ de la función en la Ec.(5.83).

En conclusión, entre el conjunto de todas las funciones $b_i(E)$ permitidas, no existe una selección de funciones tales que ΔT se haga mínima para *todos* los estados con segundo momento finito.

Capítulo 6

Explicación y observación del fenómeno de Difracción en el Tiempo

Your theory is crazy, but it's not crazy enough to be true.

Niels Bohr

La Difracción en el Tiempo (DET) es un fenómeno fundamental de la dinámica cuántica producido por obstáculos y aberturas dependientes del tiempo. Formalmente, es análogo a la difracción de la luz, y se espera que represente un papel importante en el diseño de fuentes coherentes de ondas de materia, como en el laser de átomos; el análisis de información de tiempo de vuelo y de la emisión de pulsos ultra-rápidos; y en aplicaciones en circuitos integrados óptico-atómicos de ondas coherentes de materia. Demostraremos que la DET se manifiesta de manera robusta en las ondas cuánticas emitidas por una fuente que decae exponencialmente y explicaremos el fenómeno como una interferencia de dos velocidades características, lo que nos permite controlarlo y optimizarlo [114].

6.1. Introducción

La Difracción en el Tiempo es un efecto exclusivo de la dinámica cuántica que fue estudiado en primera instancia por Moshinsky [68]. Las ondas de materia en 1D, liberadas a través de una apertura modulada en el tiempo, o después de encontrar un obstáculo que depende del tiempo (para el caso

de ondas en 2D y 3D véase [12, 33]) muestran unos patrones de penumbra e interferencia cuántica similares a la difracción de la luz por obstáculos y rendijas espaciales.

Entender y controlar la DET es cada vez más apremiante como resultado de los progresos en la manipulación de ondas coherentes de materia, particularmente en gases de átomos ultra-fríos y/o con pulsos láser ultra-cortos. La DET afectará, por ejemplo, a las aplicaciones de los láseres atómicos [18], a la dinámica de las ondas de materia emitidas por excitaciones de láser ultra-corto [87], a los circuitos de ondas de materia [98], y a la técnica de tiempo de vuelo [46]. La DET también puede facilitar versiones temporales de los difractómetros, los espectrómetros de rejilla y la holografía.

La configuración original, y la más estudiada, para encontrar DET es el obturador de Moshinsky (OM). Consiste en una súbita liberación, mediante la apertura de un dispositivo obturador, de un haz semi-infinito de ondas planas caracterizadas por su velocidad “portadora”. La densidad en función del tiempo en el punto de observación es formalmente análoga a la difracción espacial de Fresnel producida por un borde afilado [68]. Si el obturador, cuando se cierra, induce una amplitud cuántica de reflexión $R = 1$, se obtienen los mismos resultados a partir de una fuente puntual que comienza a emitir ondas de forma repentina y constante [17]. Muchos trabajos han aplicado y modificado el obturador de Moshinsky para estudiar diferentes efectos cuánticos transitorios y, añadiendo un potencial, resonancias de colisión, acumulación y decaimiento, y la dinámica de efecto túnel, véanse ejemplos en [67, 32] y *reviews* en [53, 17]. Experimentalmente, el patrón oscilatorio propio de la DET fue observado primeramente por Dalibard y sus colaboradores con átomos fríos que caían por gravedad y rebotaban en un espejo de luz evanescente que se podía encender y apagar a voluntad [109]. La difracción en el tiempo, a través de su conexión con la relación energía-tiempo, también se ha observado en experimentos con neutrones fríos [46]. Además se han descrito experimentos de interferencia entre dos rendijas temporales y analogías temporales de la difracción de una rejilla con átomos fríos [109, 21], y mediante ionización de átomos con láseres de pulsos ultra-cortos [87]. También existen interesantes analogías del obturador de Moshinsky original en el campo de las transiciones coherentes producidos por láseres débiles cuya frecuencia depende linealmente en el tiempo (*chirp*) [122].

La Difracción en el Tiempo se puede suprimir por apodización, ruido y decoherencia, o mediante una distribución amplia, poco monocromática, de velocidades portadoras [34, 17]. Por ello se ha afirmado que observarla es bastante difícil [17]. Veremos, sin embargo, que el efecto es importante y robusto en ondas emitidas por una resonancia que decae exponencialmente.

Un segundo aspecto problemático de la DET con el obturador de Moshin-

sky es la ausencia de una interpretación simple e intuitiva del fenómeno. La “explicación” habitual es geométrica, en términos de la espiral de Cornu [68, 12, 17], y no proporciona un marco físico simple, aunque se ha logrado algún avance al construirla mediante zonas de Fresnel temporales y el principio de Huygens, como en la difracción espacial [12]. El propio Moshinsky en [64], junto con Man’ko y Sharma intentó buscar una explicación en términos de la distribución de Wigner pero, como reconocieron los autores del artículo, la interpretación de los resultados era ambigua debidas a la no positividad de la función de Wigner.

En este capítulo abordaremos la interpretación de la DET y sus condiciones de observabilidad. De hecho una explicación física simple de la Difracción en el Tiempo nos proporcionará la clave para observarlo y controlarlo. El punto de partida consiste en constatar que, en sistemas que decaen exponencialmente debido a una resonancia, tal como átomos fríos en trampas ópticas o magnéticas que escapan de su confinamiento inicial [118], puede observarse DET a una distancia de la trampa. Las oscilaciones de densidad o de flujo se identifican como un efecto de interferencia, que se puede caracterizar cuantitativamente con un modelo analítico simple [111]. De este modo seremos capaces de predecir y diseñar las condiciones óptimas para observar el fenómeno, y tratar en un marco formal único la emisión constante después de un inicio brusco, y la fuente de decaimiento exponencial, modificando continuamente la parte imaginaria del polo de emisión. La Figura 6.1, que se discutirá después con más detalle, muestra la densidad no normalizada en un punto de observación alejado de la fuente. La curva superior corresponde a las oscilaciones ordinarias de la DET producidas con el obturador de Moshinsky. La amplitud de las oscilaciones en el punto de observación va disminuyendo con el tiempo, y la frecuencia de las oscilaciones depende del tiempo, tendiendo hacia un valor constante. Las otras dos curvas de la figura corresponden a fuentes con decaimiento exponencial con tiempos de vida distintos. Las oscilaciones son esencialmente iguales que las producidas con un obturador de Moshinsky estándar, pero moduladas por un decaimiento exponencial.

6.2. El modelo de fuente con decaimiento exponencial.

Usaremos un modelo que fue ideado originalmente para estudiar las desviaciones del decaimiento exponencial [111]. Proporcionamos aquí sus principales características. El modelo captura la esencia del decaimiento resonante de una trampa y describe analíticamente la función de onda externa sin

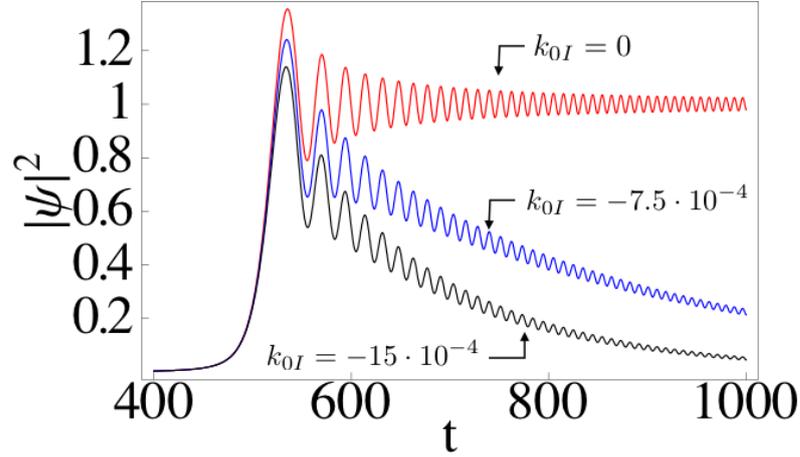


Figura 6.1: Densidad no-normalizada frente a tiempo en $x = 1000$ para los casos de fuente constante ($k_{0I} = 0$), o con decaimiento exponencial.

necesidad de precisar las complicaciones y peculiaridades de la zona de confinamiento. Adoptamos la notación de la Ref. [111] utilizando cantidades adimensionales: posición x , tiempo t , y función de onda $\psi(x, t)$, definidas en función de variables dimensionales (etiquetadas con letras mayúsculas X, T , etc..),

$$x = XK_{0R}, \quad (6.1)$$

$$t = \frac{TK_{0R}^2\hbar}{2M}, \quad (6.2)$$

$$\psi(x, t) = \Psi(X, T)/K_{0R}^{1/2}, \quad (6.3)$$

donde $K_0 = (2M\Omega_0/\hbar)^{1/2} = K_{0R} + iK_{0I}$ y M son el número de onda (generalmente complejo) y la masa respectivamente. $\Omega_0 = \Omega_{0R} + i\Omega_{0I}$ es la “frecuencia portadora compleja” de la fuente (con $\Omega_{0I} < 0$ para que $|\psi(x, t)|^2 \rightarrow 0$ cuando $t \rightarrow \infty$). $\psi(x, t)$ obedece formalmente una ecuación de Schrödinger¹ para una partícula de masa $1/2$ con $\hbar = 1$,

$$i\frac{\partial\psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial^2\psi(x, t)}{\partial x^2}. \quad (6.4)$$

Definiendo el número de onda adimensional y la frecuencia portadora como $k_0 = K_0/K_{0R}$, y $\omega_0 = \Omega_0 2M/\hbar K_{0R}^2 = k_0^2$ respectivamente, se fija con el valor uno la parte real del número de onda adimensional, $k_{0R} = 1$. La unidad

¹Véase su obtención en el Apéndice Matemático.

de longitud es el inverso de la parte real del número de onda portador, y la unidad de tiempo es el periodo portador dividido entre 2π . El número de onda complejo adimensional $k_0 = k_{0R} + ik_{0I}$ y la frecuencia portadora $\omega_0 = \omega_{0R} + i\omega_{0I}$, obedecen la relación de dispersión

$$\omega_0 = k_0^2 = (1 + ik_{0I})^2, \quad (6.5)$$

tales que $\omega_{0R} = 1 - k_{0I}^2$ y $\omega_{0I} = 2k_{0I}$, con $k_{0I} < 0$ y $k_{0R} = 1$. La solución no-normalizada de la ecuación de Schrödinger para la partícula libre subordinada a las condiciones siguientes

$$\psi(0, t) = e^{-i\omega_0 t} \Theta(t), \quad \omega_{0R} > 0, \omega_{0I} < 0, \quad (6.6)$$

se puede construir a partir de una superposición de ondas planas. La integral que resulta es²

$$\psi(x, t) = \frac{1}{2} e^{ik_s^2 t} \left[w(-u_0^{(+)}) + w(-u_0^{(-)}) \right], \quad (6.7)$$

donde $w(z) := e^{-z^2} \operatorname{erfc}(-iz)$,

$$u_0^{(\pm)} = \pm(1 + i) \sqrt{t/2} k_0 (1 \mp \tau/t), \quad (6.8)$$

y

$$k_s = x/2t, \quad \tau = x/2k_0, \quad (6.9)$$

a los que se denomina número de onda del “punto silla” y tiempo característico complejo respectivamente. La cantidad dimensional paralela a k_s , $K_s = MV_s/\hbar$, corresponde a una velocidad (también dimensional) del punto silla $V_s = X/T$. Para un punto de observación x , la velocidad del punto silla es dependiente del tiempo, $v_s = 2k_s = x/t$, mientras que $|\tau|$ señala aproximadamente el momento de llegada de la señal que decae exponencialmente. De igual forma, la parte real de τ es el tiempo en alcanzar el punto s , desde la fuente, con velocidad portadora $v_0 = K_{0,R} \hbar/M$. La Figura 6.1 muestra la densidad no-normalizada $|\psi(x, t)|^2$ para diferentes k_{0I} para ilustrar la continuidad esencial del fenómeno oscilatorio cuando se varía k_{0I} . Físicamente, la onda emitida debe estar normalizada. Para poder comparar en igualdad de condiciones entre diferentes valores de k_0 , el número total de partículas emitidas se debe mantener constante para todo k_0 . Si se emite una partícula, la función de onda normalizada es

$$\tilde{\psi}(x, t) = \frac{\psi(x, t)}{[\int_0^\infty dt J(0, t)]^{1/2}}, \quad (6.10)$$

²Véase su obtención en el Apéndice Matemático.

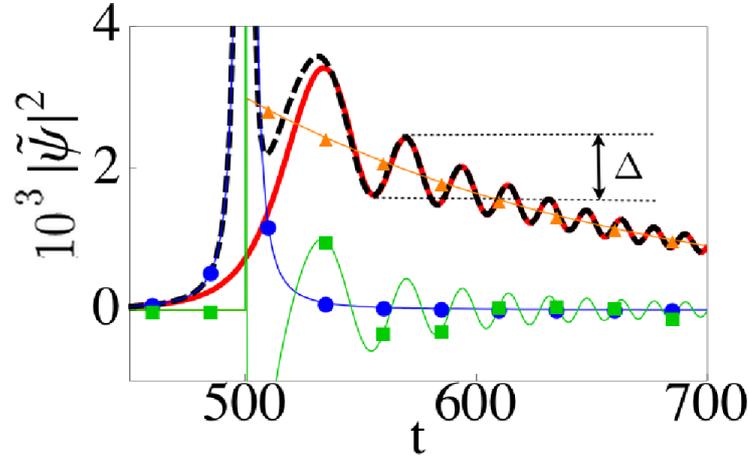


Figura 6.2: La densidad de probabilidad normalizada frente al tiempo para $k_0 = 1 - 0,0015i$ en $x = 1000$. Exacta (línea sólida roja), aproximada (Ec. (6.15), línea de trazos negra), término del punto-silla (círculos azules), término del polo (triángulos naranjas), y término de interferencia (Ec. (6.18), cuadrados verdes).

donde el flujo adimensional, $J(x, t)$, es

$$J(x, t) = 2 \operatorname{Im} \left[\psi^*(x, t) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right]. \quad (6.11)$$

6.3. La esencia de la DET

Para encontrar la esencia del fenómeno DET debemos realizar un análisis técnicamente similar al realizado para los tiempos de tuneleo [17], pero con diferente objetivo, sistema y resultados. La función de onda ψ , para tiempos menores y mayores que $|\tau|$ [111], se puede aproximar con precisión por las contribuciones de dos puntos críticos de su integral definida, el punto silla y el polo,³

$$\psi(x, t) = \psi_s(x, t) + \psi_0(x, t) \Theta[\operatorname{Im}(u_0^{(+)})], \quad (6.12)$$

donde las funciones de onda del punto silla, ψ_s , y del polo, ψ_0 , están definidos como

$$\psi_s(x, t) = \frac{e^{ik_s^2 t}}{2i\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{u_0^{(+)}} + \frac{1}{u_0^{(-)}} \right) = \frac{(2t/\pi)^{1/2} \tau e^{ik_s^2 t}}{[(i-1)k_0(t^2 - \tau^2)]}, \quad (6.13)$$

³Véase su obtención en el Apéndice Matemático.

y

$$\psi_0(x, t) = e^{ik_s^2 t} e^{-u_0^{(+)^2}} = e^{-i\omega_0 t} e^{ik_0 x}. \quad (6.14)$$

Como resultado de la deformación del camino de integración a lo largo de la trayectoria de máximo descenso desde el punto silla, el término del polo contribuye desde un tiempo en que $\text{Im}(u_0^{(+)}) = 0$, $t_c = \frac{x}{2(1+k_{0I})}$, y despues decae exponencialmente. En una asociación clásica [112], una partícula que llega a (x, t) con velocidad $v_0 = 2$ debe haber sido liberada hace un tiempo x/v_0 en la fuente que emite partículas portadoras exponencialmente. La velocidad del punto silla x/t es la que requiere una partícula clásica que parte de $(0, 0)$ para llegar a (x, t) . Para un x concreto, cada tiempo t corresponde a una trayectoria diferente del punto silla, cada vez más lenta a medida que avanza el tiempo. Esto contrasta con el valor constante de la velocidad portadora y la emisión continua de partículas portadoras. Las trayectorias del punto-silla pueden ser representadas como el resultado de un estallido, que surge de la fuente con todas las velocidades posibles en $t = 0$. Las imágenes clásicas anteriores son útiles pero, al contrario que en desviaciones a tiempos grandes del decaimiento exponencial [112], no se puede explicar el fenómeno de la Difracción en el Tiempo solo con ellas. Este es un fenómeno de interferencia cuántica como se muestra por la estructura de la densidad no-normalizada

$$\begin{aligned} |\psi(x, t)|^2 &= |\psi_s(x, t)|^2 + |\psi_0(x, t)|^2 \Theta[\text{Im}(u_0^+)] \\ &+ 2\text{Re}[\psi_s(x, t)\psi_0^*(x, t)] \Theta[\text{Im}(u_0^+)], \end{aligned} \quad (6.15)$$

donde el asterisco significa complejo conjugado. Los términos de punto de silla y polo vienen dados por

$$|\psi_s|^2 = \frac{t|\tau|^2}{\pi|k_0|^2[t^4 + |\tau|^4 - 2t^2\text{Re}(\tau^2)]}, \quad (6.16)$$

$$|\psi_0|^2 = e^{2\text{Im}(\omega_0 t - k_0 x)}, \quad (6.17)$$

y el término de interferencia es

$$\begin{aligned} 2\text{Re}[\psi_s\psi_0^*] &= \sqrt{\frac{t}{\pi}} \frac{2\beta(x, t)}{16|\omega_0|^2 t^4 + x^4 - 8t^2 x^2 \omega_{0R}} \\ &\times [(8\omega_{0R} x t^2 - 2x^3) \cos \phi + 8\omega_{0I} x t^2 \sin \phi], \end{aligned} \quad (6.18)$$

siendo la fase

$$\phi(x, t) = (\omega_{0R} + k_s^2)t - x - \frac{3\pi}{4}, \quad (6.19)$$

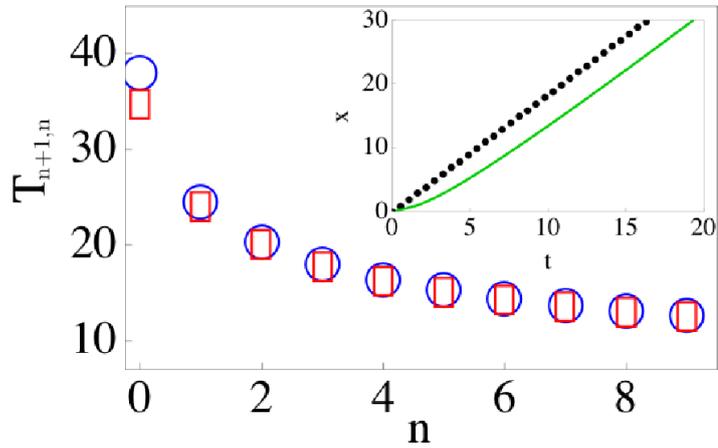


Figura 6.3: Los intervalos de tiempo $T_{n+1} - T_n$ entre dos máximos consecutivos: exacto (circulos), y aproximación de la Ec. (6.23) (cuadrados). Los parámetros son iguales que en la Fig. 6.2. El tamaño de los simbolos es para ayudar en la visualización, no está asociado a errores. En el recuadro: no-linealidad de la posición del primer máximo frente al tiempo para $k_{0I} = -0,08$ (línea solida), y término que corresponde al polo $x_c = 2(1 + k_{0I})t$ (línea de puntos).

y la función de modulación

$$\beta(x, t) = e^{\omega_{0I}t - k_{0I}x}. \tag{6.20}$$

La luz en el vacio no muestra Difracción en el Tiempo porque no hay dispersión ni por tanto interferencias de este tipo.

La figura 6.2 muestra la coincidencia a tiempos mayores y menores que $|\tau|$ entre la funciones de onda exacta y aproximada. Los términos del polo y del punto silla por separado no oscilan en el tiempo, mientras que el término de interferencia, Ec. (6.18), reproduce con precisión las oscilaciones DET.

6.4. Caracterización y observabilidad de DET

En la sección anterior hemos obtenido una expresión analítica que caracteriza el fenómeno y establece las condiciones para su observabilidad. Como hemos comentado los términos del polo y de silla en las Ecs. (6.16) y (6.17) no oscilan en el tiempo, por lo que las oscilaciones de la Ec. (6.15) son debidos al término de interferencia de la Ec. (6.18). Las dos funciones trigonométricas de la Ec. (6.18) tienen la misma fase $\phi(x, t)$ y vienen precedidas por la misma

función de modulación $\beta(x, t)$. La frecuencia de la oscilación DET depende de la interferencia de las frecuencias del punto silla y del polo k_s^2 y ω_{0R} y, como k_s depende del tiempo, el periodo de oscilación DET no es constante.

Definimos la frecuencia instantanea como

$$\nu(x, t) := \frac{1}{2\pi} \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{2\pi} (\omega_{0R} - k_s^2). \quad (6.21)$$

La dependencia del periodo de oscilación DET que se predice a partir de ν es

$$T(x, t) = \frac{1}{\nu(x, t)} = \frac{8\pi t^2}{4\omega_{0R} t^2 - x^2}. \quad (6.22)$$

De la Ec. (6.18) podemos deducir la posición del *enésimo* máximo. Para $|k_{0I}| \ll 1$, el término $\sin \phi$ de la Ec. (6.18) tiende a desaparecer por lo que las oscilaciones DET esencialmente son debidas al término $\cos \phi$. El máximo corresponde a $\phi(x, T_n) = 2n\pi$ en los tiempos

$$T_n = \frac{(3 + 8n)\pi + 4x + \sqrt{[(3 + 8n)\pi + 4x]^2 - 16\omega_{0R}x^2}}{8\omega_{0R}}, \quad (6.23)$$

donde $n = 0, 1, 2, \dots$ ($n = 0$ es el máximo principal). El intervalo $T_{n+1, n} \equiv T_{n+1} - T_n$ entre dos máximos consecutivos está en consonancia con el periodo exacto, calculado numéricamente, véase la Fig. 6.3. La pequeña discrepancia en $n = 0$ puede atribuirse a la dependencia del tiempo del factor multiplicativo $\cos \phi$ y la proximidad de $t = |\tau|$.

Para tiempos grandes, el periodo de oscilación DET tiende a ser el del periodo portador, $\lim_{n \rightarrow \infty} T_{n+1, n} = 2\pi/\omega_{0R}$. La amplitud de las oscilaciones decae de manera relativamente lenta comparada el término del polo, $e^{\omega_{0I}t} t^{-3/2}$, véase la Ec. (6.18), pero exponencialmente más rápido que el del término del punto-silla.

De acuerdo a la Ec. (6.23), T_0 es una función lineal de x . Por ejemplo, en el límite $k_{0I} \rightarrow 0$ el movimiento del primer máximo está descrito por $x_0 = 2T_0 - \sqrt{3T_0\pi}$. Aunque se puede definir una velocidad asintótica, en el caso general $2(1 + k_{0I})$, véase el detalle de la Fig. 6.3, para esta función no existe una asíntota no-oblicua. Así, una ingenua extrapolación lineal retrocediendo al origen desde una gran distancia no acierta a proporcionar el instante de encendido de la fuente. En otras palabras, los tiempos en el que las tangentes a $x_0(t)$ cortan a $x_0 = 0$ no tienen límite definido, a pesar de que la velocidad asintótica está bien definida. Esto es un ejemplo de la importancia del fenómeno de la Difracción en el Tiempo. Permite corregir extrapolaciones basadas en la dinámica clásica para deducir propiedades de

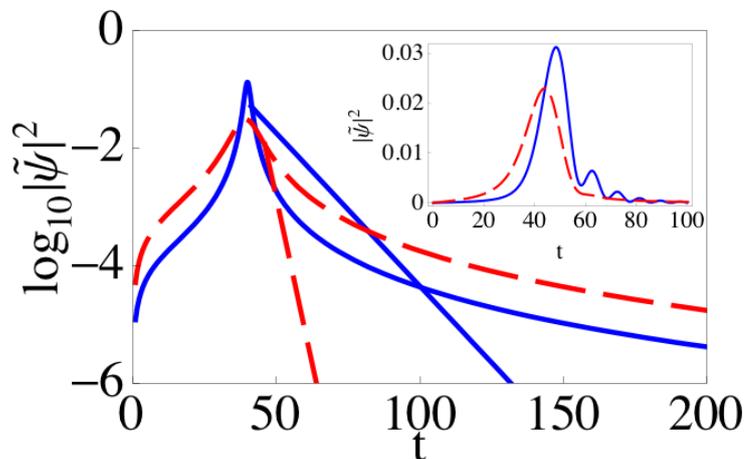


Figura 6.4: Términos de punto-silla y polo (líneas semi-infinitas) para $k_{0I} = -0,03$ (línea azul continua) y $k_{0I} = -0,13$ (línea de trazos largos roja). $x = 80$. El detalle muestra las correspondientes densidades de probabilidad exactas. Los tiempos de vida más pequeños suprimen el efecto DET.

la emisión a partir de características asintóticas de la onda. Este tipo de extrapolaciones se practica en los análisis de la ionización con pulsos de laser ultracortos, véase [3] y las referencias de ese artículo.

En nuestra descripción adimensional dos factores afectan la visibilidad del patrón de DET: la posición de observación x y el tiempo de vida. La figura 6.4 muestra el modulo del logaritmo de las densidades del polo y del punto-silla para dos tiempos de vida diferentes. El término del polo es una línea recta semi-infinita que comienza cuando el polo es atravesado por el camino descendente de mayor pendiente pasando a lo largo del punto-silla en el plano complejo de momentos, en $t_c = \frac{x}{2(1+k_{0I})}$; el término silla muestra un máximo cerca de $|\tau|$ y desde allí decae lentamente. Puede darse un máximo de dos intersecciones entre los dos términos, uno cerca del frente principal, y otro a un tiempo lejano que marca la transición al decaimiento post-exponencial [111]. Cuando los términos silla y polo son iguales o parecidos, aparecen oscilaciones de interferencia. La región de interferencia que nos interesa aquí es la que sigue al frente principal, porque es la relacionada con la Difracción en el Tiempo ordinaria del obturador de Moshinsky en el límite $k_{0I} \rightarrow 0$; es mucho más fácilmente observable que las oscilaciones de interferencia a tiempos grandes debido a la magnitud de las amplitudes.

Evidentemente, las oscilaciones no están presentes en la fuente $x = 0$, y serán pequeñas a distancias pequeñas, $x \lesssim 1$, debido al rápido decaimiento y

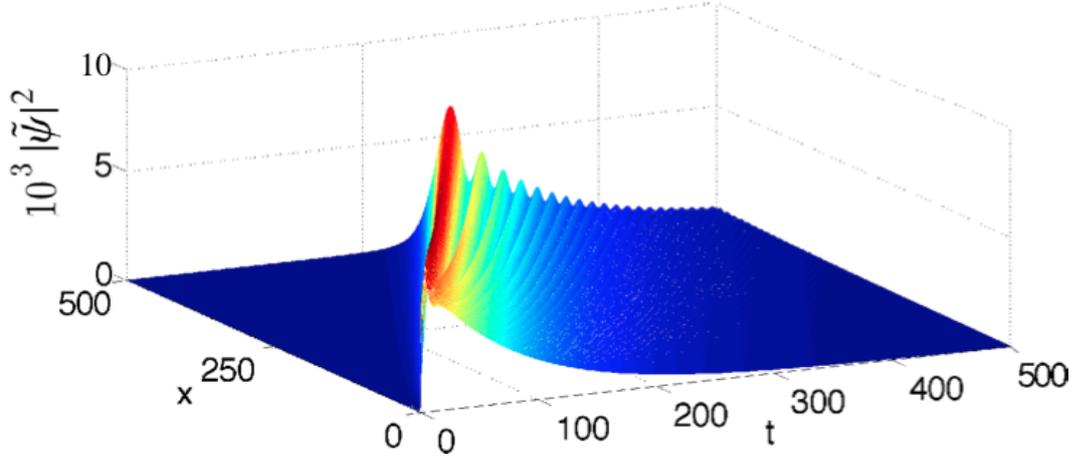


Figura 6.5: Densidad $|\tilde{\psi}(x, t)|^2$ para $k_{0I} = -0,003$ mostrando la transición de un decaimiento exponencial puro a un patrón donde predomina el efecto DET.

separación del término del polo del término punto-silla en estas condiciones, véase la Fig. 6.5. El término punto-silla más allá de del frente de llegada principal aumenta con x [111]. En el extremo opuesto de valores x muy grandes, el punto-silla domina por completo y se mantiene por encima del término del polo en todo momento, suprimiendo la DET e incluso el decaimiento exponencial [111]. Entre estos dos escenarios extremos la DET se manifiesta en un amplio intervalo de x . La pendiente del término del polo también representa un papel destacado. Si esta pendiente es grande (tiempos de vida más pequeños), las contribuciones del polo y del punto-silla se separan con más rapidez lo que conduce a un número menor de oscilaciones DIT, que pueden incluso desaparecer si el tiempo de vida es suficientemente pequeño.

Para estimar el dominio donde se observan algunas oscilaciones antes de que el decaimiento sea demasiado fuerte, podemos resolver $T_{1,0} < N\tau_0$ para un N pequeño, donde $\tau_0 = 1/4|k_{0I}|$ es el tiempo de vida. Esto nos da una expresión explícita pero algo engorrosa. Para $N = 5$ y en el límite $k_{0I} \rightarrow 0$,

$$x = \frac{100\tau_0^2}{7\pi - \sqrt{25 + 33\pi^2}} \lesssim 30\tau_0^2. \quad (6.24)$$

De la discusión previa se podría esperar que con grandes tiempos de vida siempre observaremos DET. Sin embargo, debido a normalización, los tiempos de vida grandes implican una señal más débil. La consecuencia de tendencias opuestas es un punto óptimo. Una buena medida, de relevancia experimental, de la visibilidad de DET es la diferencia Δ entre el segundo

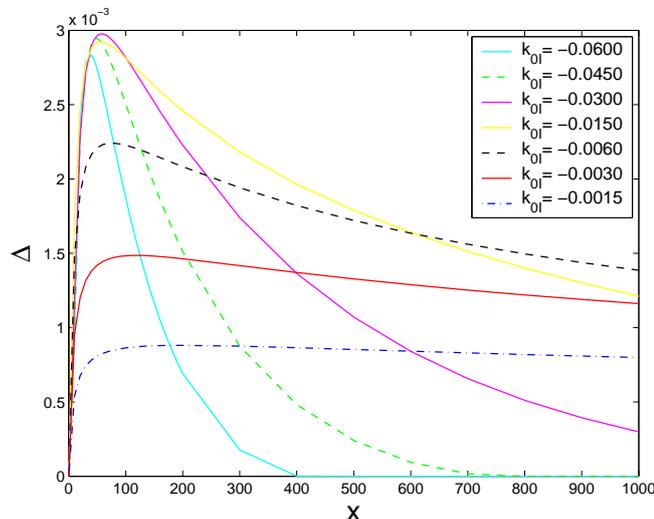


Figura 6.6: Valor de Δ : diferencia entre el segundo máximo y el primer mínimo de la curva de densidad de probabilidad normalizada. Su valor es máximo aproximadamente cuando $x = 60$ y $k_{0I} = -0,03$.

máximo y el mínimo previo en la curva de densidad de probabilidad normalizada, véase la Fig. 6.2. Después de analizar diferentes casos, véase la Fig. 6.6, los parámetros óptimos resultan ser $k_{0I} = -0,03$, $x = 60$.

6.5. Independencia de los resultados respecto al modelo.

Hemos descrito la íntima conexión entre la Difracción en el Tiempo y el decaimiento resonante. El efecto DET será visible cuando las contribuciones de las diferentes resonancias están bien separadas, lo que generalmente requiere un confinamiento en un espacio reducido o/y fuerte (barrera opaca). La DET no depende de las propiedades específicas del modelo usado hasta el momento. Hemos comprobado su robustez a partir del decaimiento exponencial explícitamente con varios modelos adicionales. El modelo de Winter [120] describe el decaimiento del estado fundamental de un pozo cuadrado entre $-L$ y 0 cuando la pared infinita del lado derecho se sustituye por un potencial $U\delta(x)$. La función de onda fuera de la trampa tiende a la función de onda del modelo fuente para grandes U [113]. Por otra parte, la DET no depende de manera drástica del confinamiento estricto de la función de onda inicial en un dominio finito. Para demostrar esto hemos calculado el

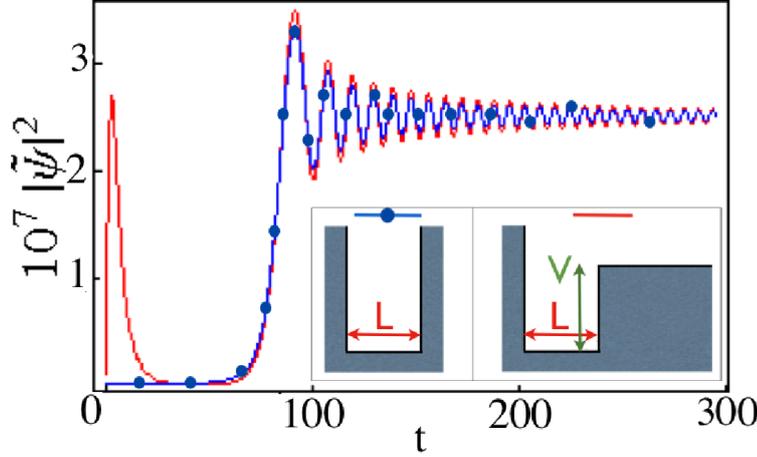


Figura 6.7: Estabilidad de la DET para el decaimiento de una partícula inicialmente confinada por un potencial $U\delta(x)$ (modelo de Winter). Los estados iniciales son los estados fundamentales de los pozos representados en el detalle de la figura. En $t = 0$ la pared derecha se sustituye por una función delta. $L = 3,14$, $x = 157,05$, $U = 161,35$, $V = 202,72$.

decaimiento del estado fundamental de un pozo con una pared finita a la derecha cuando esta pared es sustituida por una barrera de potencial delta. Esto produce un transitorio rápido diferente en x , pero la parte asociada con la resonancia dominante, de energía más baja, se mantiene esencialmente estable mostrando el mismo DET que la pared infinita, véase la Fig. 6.7. Además hemos observado la misma estabilidad para barreras de anchura finita. La DET también sobrevive a un encendido suave [18] y, como antes, puede observarse después del paso de algunos transitorios que dependen de la emisión. Con respecto al efecto de las colisiones, la DET aumenta con interacciones atractivas en el régimen de campo medio [17].

Señalaré por último la posibilidad de observar DET en estructuras periódicas [67] tales como rejillas ópticas, u otros sistemas físicos descritos por un modelo *tight-binding*, por ejemplo un matriz de guías de onda que proporcione un análogo clásico de campo eléctrico de un sistema cuántico con decaimiento exponencial [25].

Modelo de Winter. Según el convenio de notación de Winter,

$$V(X) = \begin{cases} \infty, & X < -a, \\ U\delta(X), & X \geq -a, \end{cases} \quad (6.25)$$

En su modelo el estado fundamental del pozo cuadrado infinito se toma como

la función de onda inicial,

$$\Psi(X, 0) = \begin{cases} (2/a)^{1/2} \sin(\pi X/a), & -a \leq X \leq 0, \\ 0, & X < -a \quad \text{or} \quad 0 < X. \end{cases} \quad (6.26)$$

Se introducen las siguientes variables adimensionales (añadimos el subíndice w , de Winter, en algunas de ellas para evitar confusiones con el grupo de variables utilizadas anteriormente)

$$q \equiv [a(2mE)^{1/2}]/\hbar, \quad (6.27)$$

$$t_w \equiv \hbar T/2ma^2, \quad (6.28)$$

$$x_w \equiv X/a, \quad (6.29)$$

$$G \equiv 2maU/\hbar^2, \quad (6.30)$$

Él mantuvo la función de onda dimensional,

$$\psi^w(x_w, t_w) \equiv \Psi(X, T), \quad (6.31)$$

donde

$$E = \frac{\hbar^2 K_{0R}^2}{2m}, \quad (6.32)$$

y $K_{0R} = \pi/a$ es el número de onda de la partícula en el estado inicial, Ec. (6.26). Para $G \gg 1$ la función de onda total para cualquier x_w y t_w fuera de la barrera se puede dividir en dos términos, uno debido a la contribución del punto-silla y el otro debido al polo [120]. Estos son respectivamente

$$\begin{aligned} \psi_s^w &= \frac{(1+i)(Gx_w+1)}{2n\pi G^2 \sqrt{\pi a t_w^{3/2}}} \\ &\times \left[1 - \frac{3i}{2t_w} \left(\frac{1}{n^2 \pi^2} - \frac{x_w^2}{6} - \frac{x_w^2(Gx_w+1)}{3} \right) \right], \end{aligned} \quad (6.33)$$

$$\begin{aligned} \psi_0^w &= \sqrt{\frac{2}{a}} \left(\frac{n\pi}{G} \right) e^{-i\epsilon_w t_w - t_w/2\tau_w} \\ &\times [\cos(n\pi x_w) + i \sin(n\pi x_w)], \end{aligned} \quad (6.34)$$

donde la energía adimensional ϵ_w y el tiempo de vida τ_w están dados por

$$\epsilon_w = n^2 \pi^2 (1 - 2/G), \quad (6.35)$$

$$1/\tau_w = \frac{4\pi^3 n^3}{G^2} \left(1 - \frac{4}{G} \right). \quad (6.36)$$

Ahora mostramos que el modelo de fuente descrito anteriormente puede reproducir el modelo de Winter. Esto significa que las Ecs. (6.13) y (6.14)

producen las mismas probabilidades que las Ecs. (6.33) y (6.34). Primero, de las Ecs. (6.1) y (6.29) y de las Ecs. (6.2) y (6.28) podemos relacionar coordenadas espaciales y temporales,

$$x = \pi x_w, \quad t = \pi^2 t_w. \quad (6.37)$$

Usando la función de onda dimensional en el polo $\Psi_0(X, T)$, obtenemos las relaciones entre las restantes variables. Para el modelo de fuente usamos la función normalizada dada por la Ec. (6.10) y el hecho de que la función de onda adimensional está conectada a la dimensional a través de la Ec. (6.3), donde $L^{-1} = K_{0R}$ y, para el pozo cuadrado infinito de anchura a , $K_{0R} = \pi/a$. Entonces la función de onda del polo se puede escribir como

$$\Psi_0(X, T) = \sqrt{\frac{\pi}{aN}} \psi_0(x, t) = \psi_0^w(x_w, t_w), \quad (6.38)$$

donde la constante de normalización $N = N_+(t = \infty)$ para el modelo de fuente viene dada por la Ec. (6.34). De la Ec. (6.38) y usando las Ecs. (6.33) y (6.34), obtenemos en primer orden en G ,

$$N_+(t = \infty) = \frac{G^2}{2\pi}, \quad k_{0I} = -\frac{\pi}{G^2}. \quad (6.39)$$

Empezando por la Ec. (6.33) y utilizando las Ecs. (6.37) y (6.39) también podemos comprobar que la probabilidad obtenida a partir de la función de onda del punto-silla en el modelo de fuente reproduce el modelo de Winter para potenciales fuertes, $G \gg 1$, en el régimen $t \gg |\tau|$,

$$|\Psi_s(X, T)|^2 = \frac{\pi}{aN} |\psi_s(x, t)|^2 = |\psi_w(x_w, t_w)|^2. \quad (6.40)$$

hasta el orden t_w^{-3} .

Capítulo 7

Conclusiones

Los principales resultados obtenidos en este trabajo sobre el tiempo como observable en la teoría cuántica se pueden resumir de la siguiente manera:

- La distribución cuántica del tiempo de permanencia, TDP , para una partícula en una región del espacio y su segundo momento presentan características cuánticas incluso en el caso más simple posible, el movimiento libre, como la bimodalidad (debido a la existencia de dos autovalores diferentes para la misma energía). La desviación respecto al comportamiento clásico es mayor cuando la longitud de onda de Broglie es del mismo orden o mayor que la región considerada.
- Se ha ampliado considerablemente el estudio iniciado por Pollak y Miller sobre la relación entre el tiempo de permanencia cuántico y las funciones de correlación flujo-flujo (FCFF), y se ha comprobado que no solamente, como ellos demostraron, existe coincidencia entre los resultados del primer momento para una distribución microcanónica estacionaria y el operador de TDP; los resultados entre ambos métodos también coinciden para los segundos momentos, incluso en el caso de funciones de correlación flujo-flujo dependientes del tiempo.
- Se ha propuesto un proceso de medición del segundo momento del tiempo de permanencia mediante funciones de correlación flujo-flujo. Esto es interesante porque el segundo momento, al contrario del primero, muestra un carácter cuántico y difiere estructural y numéricamente de la correspondiente cantidad clásica.
- Mientras los análisis del tiempo de permanencia cuántico se han limitado hasta ahora a su valor medio, los resultados que se muestran aquí motivan una investigación sobre el papel que representa el segundo momento (en estados puros y para un Hamiltoniano dado) del tiempo de

permanencia en campos tales como fluctuaciones del tiempo de vida, sistemas caóticos, conductividad, sistemas mesoscópicos, o metrología tiempo-frecuencia.

- Quedan abiertas algunas cuestiones como por ejemplo, ¿Afecta el segundo momento a la calidad de los relojes atómicos ultra-fríos?, ya que el tiempo empleado por el átomo en una región del espacio determina su estabilidad, la cual, en principio, aumenta para átomos lentos, pero a la vez, los efectos producidos por el movimiento cuántico son tanto más importantes cuanto menor sea la velocidad de los átomos.
- He estudiado nuevos efectos cuánticos en relojes atómicos. Se proporcionan expresiones analíticas en las configuraciones de tipo Rabi y Ramsey para el desplazamiento del máximo, Δ_Q^M , en la curva de excitación exacta, $P_{12}^Q(\Delta)$, y se comprueba que estos desplazamientos son mayores en el caso de Rabi.
- Los desplazamientos $\Delta_Q^{(hh)}$ producidos por la asimetría a media altura en las curvas de resonancia utilizadas en los relojes atómicos en las configuraciones tipo de Rabi y Ramsey obedecen $\Delta_Q^{(hh)} \gg \Delta_Q^M$. Además, este último desplazamiento se cancela cuando se promedia sobre las velocidades incidentes.
- Las propiedades del desplazamiento a media altura, $\Delta_Q^{(hh)}$, para la configuración de Ramsey son:
 - Es independiente de la velocidad incidente.
 - Aumenta a medida que lo hace el ratio entre espacio entre campos y la anchura de interacción $N = L/l$.
 - Aumenta cuando disminuye la longitud de interacción del láser, l .
- Se deduce la forma más general posible de un operador de tiempo covariante normalizado y se aplica en los operadores de tiempo de reloj, operadores de tiempo llegada, y operadores de Lyapunov.
- Condiciones físicas como varianza mínima ΔT e invarianza frente a la inversión temporal llevan a la unicidad del operador de tiempo, \hat{T} , y la función de distribución $\hat{\Pi}_t$.
- Los resultados anteriores se han aplicado al tiempo de llegada de una partícula libre en el semi-espacio $x > 0$ y al tiempo de llegada de los estados asintóticos de una partícula en un potencial delta sobre un semi-espacio $x > 0$. Como consecuencia de este análisis se recupera la

expresión del tiempo de retardo de Smith entre las ondas asintóticas saliente y entrante.

- Los operadores de Lyapunov surgen de manera natural de los observables de tiempo covariantes. Asociados a los operadores de tiempo de llegada, estos operadores consideran, para estados asintóticamente libres, la acumulación monótona de llegadas desde el pasado infinito independientemente de cuál sea el estado elegido, y se muestra que en teorías con un Hamiltoniano invariante con respecto a inversiones temporales *no* existen operadores de Lyapunov invariantes.
- Según el criterio utilizado para caracterizar un sistema como irreversible y distinguir una dirección del tiempo, el funcional de Lyapunov debería ser invariante bajo inversión temporal. Por lo tanto, si se acepta esta premisa, a partir de nuestros resultados, para un Hamiltoniano invariante con respecto a inversiones temporales la mecánica cuántica, para un número finito de partículas, es reversible y *no* muestra una flecha preferente del tiempo.
- Para tiempos mayores o menores que el tiempo τ que onda que se emite súbitamente y que decae exponencialmente emplea en llegar al punto de observación, la función de onda, ψ , de la partícula se puede aproximar por las contribuciones del punto-silla y del polo.
- A partir de lo anterior, se observa que el término de interferencia es el que produce las oscilaciones transitorias de las densidad del probabilidad, ψ , de la partícula, fenómeno conocido como Difracción en el Tiempo (DET).
- Se caracteriza el fenómeno de Difracción en el Tiempo y se concluye que este es importante cuando las contribuciones del punto-silla y del polo son comparables. Esto ocurre cuando se aleja el punto de observación de la fuente.
- A pesar de conocerse el valor de la velocidad asintótica de la partícula, a partir de ella y retrocediendo linealmente al origen no se puede precisar el instante de emisión.
- El fenómeno de DET será más visible cuanto más separadas esten las diferentes resonancias (mayor separación entre segundo máximo y primer mínimo), lo que requiere el confinamiento en un espacio reducido.

- Los resultados anteriores sobre DET solo dependen débilmente de las propiedades específicas del modelo.

Capítulo 8

Publicaciones de la Tesis

- *Dwell-time distributions in quantum mechanics.*
J. Muñoz, I. L. Egusquiza, A. del Campo, D. Seidel, y J. G. Muga, Lect. Notes Phys. **789**, 97 (2009).
- *Relation between quantum dwell times and flux-flux correlations.*
J. Muñoz, D. Seidel, y J. G. Muga, Phys. Rev. A **79**, 012108 (2009).
- *Low-velocity limits of cold-atom clocks.*
J. Muñoz, I. Lizuain, y J. G. Muga, Phys. Rev. A **80**, 022116 (2009).
- *Manufacturing time operators: Covariance, selection criteria, and examples.*
G. C. Hegerfeldt, J. G. Muga, y J. Muñoz, Phys. Rev. A **82**, 012113 (2010).
- *Explanation and observability of diffraction in time.*
E. Torrontegui, J. Muñoz, Yue Ban, y J. G. Muga, arXiv:1011.4278, aceptado en Phys. Rev. A.

Capítulo 9

Apéndice Matemático

Obtención de la Ec. (2.4)

Como el operador \hat{T}_D conmuta con el Hamiltoniano, introduciendo la resolución de la unidad se tiene

$$\begin{aligned}\hat{T}_D|E, \alpha\rangle &= \sum_{\beta} |E', \beta\rangle \langle E', \beta| \hat{T}_D|E, \alpha\rangle \\ &= \sum_{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{it(E'-E)/\hbar} |E', \beta\rangle \langle E', \beta| \chi_D(\hat{x})|E, \alpha\rangle \\ &= 2\pi\hbar \sum_{\beta} \langle E, \beta| \chi_D(\hat{x})|E, \alpha\rangle |E, \beta\rangle.\end{aligned}$$

Obtención de las Ecs. (2.5) y (2.6)

En la capa de energía, donde $E_{k'} = E_k$,

$$\begin{aligned}\langle \phi_{k'} | \hat{T}_D | \phi_k \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle \phi_{k'} | dt e^{i\hat{H}t/\hbar} \chi_D(\hat{x}) e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \phi_k \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{it(E_{k'}-E_k)/\hbar} \langle \phi_{k'} | \chi_D(\hat{x}) | \phi_k \rangle = 2\pi\hbar \delta(E_{k'} - E_k) \langle \phi_{k'} | \chi_D(\hat{x}) | \phi_k \rangle \\ &= \delta(E_{k'} - E_k) \frac{|k|\hbar^2}{m} \left(\frac{2\pi m}{|k|\hbar} \right) \langle \phi_{k'} | \chi_D(\hat{x}) | \phi_k \rangle = \delta(E_{k'} - E_k) \frac{|k|\hbar^2}{m} \mathsf{T}_{kk'},\end{aligned}$$

donde

$$\mathsf{T}_{kk'} = \left(\frac{2\pi m}{|k|\hbar} \right) \langle \phi_{k'} | \chi_D(\hat{x}) | \phi_k \rangle, \quad E_{k'} = E_k.$$

Obtención de la Ec. (2.7)

Partiendo de la Ec.(2.6), y sabiendo que la densidad de corriente de una onda plana es $j(k) = \frac{\hbar|k|}{m}$ y $\phi_k(x) = \langle x|\phi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}$, se tiene que

$$\begin{aligned} \mathsf{T}_{kk} &= \frac{2\pi m}{|k|\hbar} \langle \phi_k | \chi_D(\hat{x}) | \phi_k \rangle = \frac{2\pi m}{|k|\hbar} \int_{x_1}^{x_2} dx \langle \phi_k | x \rangle \langle x | \phi_k \rangle \\ &= \frac{m}{|k|\hbar} \int_{x_1}^{x_2} dx |\phi_k(x)|^2 = \frac{1}{j(k)} \int_{x_1}^{x_2} dx |\phi_k(x)|^2. \end{aligned}$$

Obtención de la Ec. (2.13)

Utilizando la resolución de la unidad, $\int_{-\infty}^{\infty} dk |\phi_k\rangle \langle \phi_k| = 1$,

$$\langle \psi | \hat{T}_D | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dk \int_{-\infty}^{\infty} dk' \langle \psi | \phi_k \rangle \langle \phi_k | \hat{T}_D | \phi_{k'} \rangle \langle \phi_{k'} | \psi \rangle.$$

Utilizando la Ec.(2.5), sustituyendo $|\psi\rangle$ por $|\psi^{in}\rangle$ y $|\phi_k\rangle$ por $|k\rangle$, y teniendo en cuenta las siguientes condiciones:

- $E_k = E_{k'}$ con lo que $k' = k$ ó $k' = -k$
- $k > 0$, con lo que los términos que contengan $\delta(k' + k)$ desaparecen, finalmente se llega a

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{T}_D | \psi \rangle &= \int_0^{\infty} dk \int_0^{\infty} dk' \langle \psi^{in} | k \rangle \langle k | \hat{T}_D | k' \rangle \langle k' | \psi^{in} \rangle \\ &= \int_0^{\infty} dk \int_0^{\infty} dk' \langle \psi^{in} | k \rangle \langle k' | \psi^{in} \rangle \delta(k - k') \mathsf{T}_{kk'} \\ &= \int_0^{\infty} dk |\langle k | \psi^{in} \rangle|^2 \mathsf{T}_{kk}. \end{aligned}$$

Obtención de la Ec. (2.14)

Utilizando la resolución de la unidad con los autoestados de energía, $|\phi_k\rangle$,

$$\langle \psi | \hat{T}_D^2 | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dk \int_{-\infty}^{\infty} dk' \langle \psi | \phi_k \rangle \langle \phi_k | \hat{T}_D^2 | \phi_{k'} \rangle \langle \phi_{k'} | \psi \rangle.$$

Ahora, aprovechando la definición de la unidad, el término $\langle \phi_k | \widehat{T}_D^2 | \phi_{k'} \rangle$ se puede calcular por separado como

$$\begin{aligned} \langle \phi_k | \widehat{T}_D^2 | \phi_{k'} \rangle &= \langle \phi_k | \widehat{T}_D \widehat{T}_D | \phi_{k'} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dk'' \langle \phi_k | \widehat{T}_D | \phi_{k''} \rangle \langle \phi_{k''} | \widehat{T}_D | \phi_{k'} \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dk'' \frac{\hbar^4}{m^2} |k| |k''| \delta(E_k - E_{k''}) \delta(E_{k''} - E_{k'}) \mathbb{T}_{kk''} \mathbb{T}_{k''k'} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dk'' [\delta(k'' - k) + \delta(k'' + k)] [\delta(k'' - k') + \delta(k'' + k')] \mathbb{T}_{kk''} \mathbb{T}_{k''k'}, \end{aligned}$$

donde se ha utilizado la relación $\delta(E_k - E_{k'}) = \frac{m}{\hbar|k|} [\delta(k - k') + \delta(k + k')]$.

Integrando sobre k'' , y como antes, trabajando en la capa de energía y para momentos positivos, $k > 0, k' > 0$,

$$\langle \phi_k | \widehat{T}_D^2 | \phi_{k'} \rangle = \delta(k - k') [\mathbb{T}_{kk} \mathbb{T}_{kk} + \mathbb{T}_{k,-k} \mathbb{T}_{-k,k}].$$

Sustituyendo esto en la expresión inicial, y sustituyendo $|\psi\rangle$ por $|\psi^{in}\rangle$ y $|\phi_{k'}\rangle$ por $|k'\rangle$ tenemos que

$$\begin{aligned} \langle \psi^{in} | \widehat{T}_D^2 | \psi^{in} \rangle &= \int_0^{\infty} dk \int_0^{\infty} dk' \langle \psi^{in} | k \rangle \delta(k - k') [\mathbb{T}_{kk} \mathbb{T}_{kk} + \mathbb{T}_{k,-k} \mathbb{T}_{-k,k}] \langle k' | \psi^{in} \rangle \\ &= \int_0^{\infty} dk [\mathbb{T}_{kk} \mathbb{T}_{kk} + \mathbb{T}_{k,-k} \mathbb{T}_{-k,k}] |\langle k | \psi^{in} \rangle|^2. \end{aligned}$$

Obtención de las Ecs. (2.15) y (2.16)

Partimos de la Ec. (2.6) y tomamos la región D de interés entre los puntos $x_1 = 0; x_2 = L$. Además en la capa de energía $E_k = E_{-k}$,

$$\begin{aligned} \mathbb{T}_{kk} &= \mathbb{T}_{-k,-k} = \frac{mL}{|k|\hbar}, \\ \mathbb{T}_{k,-k} &= \frac{m}{|k|\hbar} \left(\frac{1 - e^{-2ikL}}{2ik} \right), \\ \mathbb{T}_{-k,k} &= \frac{m}{|k|\hbar} \left(\frac{e^{2ikL} - 1}{2ik} \right) \end{aligned}$$

Se pueden calcular los autovalores, t_{\pm} , y los autoestados, $|t_{\pm}, D\rangle$, de la matriz,

$$\mathbb{T} = \begin{pmatrix} \mathbb{T}_{k,k} & \mathbb{T}_{k,-k} \\ \mathbb{T}_{-k,k} & \mathbb{T}_{-k,-k} \end{pmatrix},$$

a partir de la ecuación de autovalores

$$\mathbb{T}|t_{\pm}, D\rangle = t_{\pm}|t_{\pm}, D\rangle.$$

Adoptando el convenio

$$|k\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$|-k\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

obtenemos los siguientes resultados:

$$|t_{\pm}(k), D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|k\rangle \pm e^{ikL} |-k\rangle],$$

y

$$t_{\pm}(k) = \frac{mL}{k\hbar} \left(1 \pm \frac{1}{kL} \sin kL \right).$$

Obtención de la Ec. (3.3)

Aprovechando las propiedades de $\widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(t)$, vemos que, por la ecuación de continuidad,

$$\int d\widehat{J}(x, t) = - \int \frac{d}{dt} \widehat{\rho}(x, t) dx = - \frac{d}{dt} \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(t).$$

Evaluando esta derivada para cualquier valor de τ y para $\tau = 0$,

$$\begin{aligned} \left(- \frac{d}{dt} \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(t) \right)_{t=\tau} &= - \frac{d}{d\tau} \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(\tau) = \widehat{J}(x_2, \tau) - \widehat{J}(x_1, \tau) \\ \left(- \frac{d}{dt} \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(t) \right)_{t=0} &= \widehat{J}(x_2, 0) - \widehat{J}(x_1, 0). \end{aligned}$$

Finalmente, multiplicando entre sí estas dos últimas expresiones y añadiendo el factor $-2\pi\hbar\delta^+(E_k - \widehat{H})$ queda lo que buscábamos,

$$\begin{aligned} &-2\pi\hbar \left[\widehat{J}(x_2, \tau) - \widehat{J}(x_1, \tau) \right] \left[\widehat{J}(x_2, 0) - \widehat{J}(x_1, 0) \right] \delta^+(E_k - \widehat{H}) \\ &= -2\pi\hbar \frac{d}{d\tau} \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(\tau) \left(\frac{d}{dt} \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(t) \right)_{t=0} \delta^+(E_k - \widehat{H}) = \widehat{C}_{PM}^+(\tau, k). \end{aligned}$$

Obtención de la Ec. (3.7)

El punto de partida es

$$\mathcal{I} = \text{Tr} \left\{ \int_0^\infty d\tau \tau^2 \widehat{C}_{PM}^+(\tau, k) \right\}.$$

Integrando por partes, despreciando el termino en el infinito, y usando la ecuación de movimiento de Heisenberg, toma la forma

$$\mathcal{I} = \frac{4\pi m}{i\hbar^2 k} \int_0^\infty d\tau \tau \langle \phi_k | \widehat{\chi}_R(\tau) [\widehat{\chi}_R(0), \widehat{H}] | \phi_k \rangle.$$

Haciendo uso de que ϕ_k es un autoestado de \widehat{H} , y reordenando,

$$\mathcal{I} = \frac{4\pi m}{i\hbar^2 k} \int_0^\infty d\tau \tau \langle \phi_k | [\widehat{H}, \widehat{\chi}_R(\tau)] \widehat{\chi}_R(0) | \phi_k \rangle.$$

Integrando otra vez por partes y usando la ecuación de Heisenberg una vez más,

$$\mathcal{I} = \frac{4\pi m}{\hbar k} \int_0^\infty d\tau \langle \phi_k | \widehat{\chi}_R(\tau) \widehat{\chi}_R(0) | \phi_k \rangle.$$

Ahora se toma la parte real,

$$\text{Re}(\mathcal{I}) = \frac{\mathcal{I} + \mathcal{I}^*}{2} = \frac{2\pi m}{\hbar k} \int_0^\infty d\tau \langle \phi_k | [\widehat{\chi}_R(\tau) \widehat{\chi}_R(0) + \widehat{\chi}_R(0) \widehat{\chi}_R(\tau)] | \phi_k \rangle,$$

y se introduce la resolución de la identidad,

$$\begin{aligned} \text{Re}(\mathcal{I}) = & \left\{ \frac{2\pi m}{\hbar k} \right. \\ & \times \int_0^\infty d\tau \int_{-\infty}^\infty dk' \int_{x_1}^{x_2} dx \int_{x_1}^{x_2} dx' e^{i(E_k - E_{k'})\tau/\hbar} \\ & \left. \times \phi_k^*(x) \phi_{k'}(x) \phi_{k'}^*(x') \phi_k(x') \right\} + c.c., \end{aligned}$$

donde *c.c* significa complejo conjugado. Haciendo los cambios $\tau \rightarrow -\tau$ y $x, x' \rightarrow x', x$ en el término *c.c*, este toma la misma forma que el primero, pero con la integral de tiempo desde $-\infty$ a 0. Añadiendo los dos términos, la integral sobre τ proporciona una delta de energía que se puede separar en dos deltas de momentos que seleccionan $k' = \pm k$ para llegar a la Ec.(3.7).

Obtención de la Ec. (3.11)

Integrando por partes, sobre la variable τ , la ecuación de $C(\tau)$,

$$\begin{aligned} C(\tau) &= - \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_0^{\infty} d\tau \frac{d}{d\tau} \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(\widehat{x}, t + \tau) \frac{d}{dt} \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(\widehat{x}, t) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(t) \frac{d}{dt} \widehat{\chi}_{\mathcal{R}}(t) = 0. \end{aligned}$$

debido a que el integrando es impar.

Obtención de las Ecs. (3.14) y (3.15)

Sustituyendo en la expresión (2.14), $|\psi^{in}\rangle$ por el autovalor del Hamiltoniano de una partícula con movimiento libre, $|k\rangle$, tal que $\phi_k(x) = \langle x|\phi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$,

$$\begin{aligned} \langle k|\widehat{T}_D^1|k\rangle &= (\mathbb{T})_{kk} = \mathbb{T}_{kk}, \\ \langle k|\widehat{T}_D^2|k\rangle &= (\mathbb{T}^2)_{kk} = \mathbb{T}_{kk}\mathbb{T}_{kk} + \mathbb{T}_{k,-k}\mathbb{T}_{-k,k}. \end{aligned}$$

Tomando la región D de interés entre los puntos $x_1 = 0$, $x_2 = L$,

$$\begin{aligned} \mathbb{T}_{kk} &= \frac{mL}{|k|\hbar}, \\ \mathbb{T}_{k,-k} &= \frac{m}{|k|\hbar} \left(\frac{1 - e^{-2ikL}}{2ik} \right), \\ \mathbb{T}_{-k,k} &= \frac{m}{|k|\hbar} \left(\frac{e^{2ikL} - 1}{2ik} \right), \end{aligned}$$

con lo que nos quedan las expresiones buscadas,

$$\begin{aligned} \mathbb{T}_{kk} &= \frac{mL}{\hbar k}, \\ (\mathbb{T}^2)_{kk} &= \frac{m^2 L^2}{\hbar^2 k^2} \left(1 + \frac{\sin^2(kL)}{k^2 L^2} \right). \end{aligned}$$

Obtención de la Ec. (3.16)

Aprovechando la definición de la unidad y la obtención de las Ecs. (3.14) y (3.15),

$$\begin{aligned}
\langle \phi_k | \widehat{T}_D^3 | \phi_{k'} \rangle &= \langle \phi_k | \widehat{T}_D \widehat{T}_D \widehat{T}_D | \phi_{k'} \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dk''' \int_{-\infty}^{\infty} dk'' \langle \phi_k | \widehat{T}_D | \phi_{k''} \rangle \langle \phi_{k''} | \widehat{T}_D | \phi_{k'''} \rangle \langle \phi_{k'''} | \widehat{T}_D | \phi_{k'} \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dk''' \int_{-\infty}^{\infty} dk'' \left(\frac{\hbar^2}{m} \right)^3 |k| |k''| |k'''| \\
&\times \delta(E_k - E_{k''}) \delta(E_{k''} - E_{k'''}) \delta(E_{k'''} - E_{k'}) \mathbb{T}_{kk''} \mathbb{T}_{k''k'''} \mathbb{T}_{k'''k'} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dk''' \int_{-\infty}^{\infty} dk'' [\delta(k'' - k) + \delta(k'' + k)] \\
&\times [\delta(k'' - k''') + \delta(k'' + k''')] [\delta(k''' - k') + \delta(k''' + k')] \\
&\times \mathbb{T}_{kk''} \mathbb{T}_{k''k'''} \mathbb{T}_{k'''k'}.
\end{aligned}$$

Integrando sobre k'' y k''' , y como antes, en la capa de energía y para momentos positivos, $k > 0, k' > 0$, se seleccionan los valores que cumplen $k = k'$,

$$\langle \phi_k | \widehat{T}_D^3 | \phi_k \rangle = (\mathbb{T}_{k,k})^3 + \mathbb{T}_{k,k} \mathbb{T}_{k,-k} \mathbb{T}_{-k,k} + \mathbb{T}_{k,-k} \mathbb{T}_{-k,-k} \mathbb{T}_{-k,k} + \mathbb{T}_{k,-k} \mathbb{T}_{-k,k} \mathbb{T}_{k,k}.$$

Utilizando las expresiones para $\mathbb{T}_{i,j}$ encontradas en la obtención de las Ecs. (3.14) y (3.15), llegamos a la expresión buscada,

$$\langle \phi_k | \widehat{T}_D^3 | \phi_k \rangle = (\mathbb{T}^3)_{kk} = \frac{m^3 L^3}{\hbar^3 k^3} \left(1 + 3 \frac{\sin^2(kL)}{k^2 L^2} \right).$$

Obtención de la Ec. (3.32)

La expresión $\langle \psi | \widehat{J}(x_i, t) | \psi_j^Q \rangle$ se puede calcular a partir de elementos diagonales mediante los estados auxiliares

$$\begin{aligned}
|\psi_1\rangle &= |\psi\rangle + |\psi_j^Q\rangle, \\
|\psi_2\rangle &= |\psi\rangle + i|\psi_j^Q\rangle, \\
|\psi_3\rangle &= |\psi\rangle - i|\psi_j^Q\rangle.
\end{aligned}$$

Operamos con estas ecuaciones para escribir

$$\begin{aligned}
\langle \psi_1 | \widehat{J}(x, t) | \psi_1 \rangle &= \langle \psi | \widehat{J}(x, t) | \psi \rangle + \langle \psi_j^Q | \widehat{J}(x, t) | \psi_j^Q \rangle + \langle \psi | \widehat{J}(x, t) | \psi_j^Q \rangle + \langle \psi_j^Q | \widehat{J}(x, t) | \psi \rangle, \\
\langle \psi_2 | \widehat{J}(x, t) | \psi_2 \rangle &= \langle \psi | \widehat{J}(x, t) | \psi \rangle + \langle \psi_j^Q | \widehat{J}(x, t) | \psi_j^Q \rangle + i \langle \psi | \widehat{J}(x, t) | \psi_j^Q \rangle - i \langle \psi_j^Q | \widehat{J}(x, t) | \psi \rangle, \\
\langle \psi_3 | \widehat{J}(x, t) | \psi_3 \rangle &= \langle \psi | \widehat{J}(x, t) | \psi \rangle + \langle \psi_j^Q | \widehat{J}(x, t) | \psi_j^Q \rangle - i \langle \psi | \widehat{J}(x, t) | \psi_j^Q \rangle + i \langle \psi_j^Q | \widehat{J}(x, t) | \psi \rangle.
\end{aligned}$$

Multiplicando por 2 la primera expresión, y restándole las otras dos expresiones,

$$2\langle\psi_1|\widehat{J}(x,t)|\psi_1\rangle - \langle\psi_2|\widehat{J}(x,t)|\psi_2\rangle - \langle\psi_3|\widehat{J}(x,t)|\psi_3\rangle = 4\text{Re}[\langle\psi|\widehat{J}(x,t)|\psi_j^Q\rangle],$$

de donde

$$\text{Re}[\langle\psi|\widehat{J}(x,t)|\psi_j^Q\rangle] = \frac{1}{2}\langle\psi_1|\widehat{J}(x,t)|\psi_1\rangle - \frac{1}{4}\langle\psi_2|\widehat{J}(x,t)|\psi_2\rangle - \frac{1}{4}\langle\psi_3|\widehat{J}(x,t)|\psi_3\rangle.$$

Igualmente, multiplicando la segunda ecuación por 2 y restándole la primera y la tercera,

$$\begin{aligned} & 2\langle\psi_2|\widehat{J}(x,t)|\psi_2\rangle - \langle\psi_1|\widehat{J}(x,t)|\psi_1\rangle - \langle\psi_3|\widehat{J}(x,t)|\psi_3\rangle \\ & = -6\text{Im}[\langle\psi|\widehat{J}(x,t)|\psi_j^Q\rangle] - 2\text{Re}[\langle\psi|\widehat{J}(x,t)|\psi_j^Q\rangle], \end{aligned}$$

de donde

$$\text{Im}[\langle\psi|\widehat{J}(x,t)|\psi_j^Q\rangle] = \frac{1}{4}\langle\psi_2|\widehat{J}(x,t)|\psi_2\rangle - \frac{1}{4}\langle\psi_1|\widehat{J}(x,t)|\psi_1\rangle.$$

A partir de todo esto, reuniendo resultados se tiene que como

$$\langle\psi|\widehat{J}(x,t)|\psi_j^Q\rangle = \text{Re}[\langle\psi|\widehat{J}(x,t)|\psi_j^Q\rangle] + i\text{Im}[\langle\psi|\widehat{J}(x,t)|\psi_j^Q\rangle],$$

sustituyendo en esta última expresión las expresiones explícitas, nos queda el resultado deseado en función de términos diagonales

$$\begin{aligned} \langle\psi|\widehat{J}(x,t)|\psi_j^Q\rangle & = \frac{1}{2}\langle\psi_1|\widehat{J}(x,t)|\psi_1\rangle - \frac{1}{4}\langle\psi_2|\widehat{J}(x,t)|\psi_2\rangle \\ & - \frac{1}{4}\langle\psi_3|\widehat{J}(x,t)|\psi_3\rangle + \frac{i}{4}\langle\psi_3|\widehat{J}(x,t)|\psi_3\rangle \\ & - \frac{i}{4}\langle\psi_2|\widehat{J}(x,t)|\psi_2\rangle. \end{aligned}$$

Obtención de la Ec. (5.3)

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \widehat{\Pi}_\tau & = \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \int \int dE dE' e^{-i(E-E')\tau/\hbar} |E\rangle\langle E'| \\ & = \frac{2\pi\hbar}{h} \int \int dE dE' \delta(E - E') |E\rangle\langle E'| = \int dE |E\rangle\langle E| = \hat{1}. \end{aligned}$$

Obtención de la Ec. (5.11)

Aplicando el cambio de variable $\tau - t = \tau'$,

$$\begin{aligned}
 e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{T} e^{-i\hat{H}t/\hbar} &= \int d\tau \tau e^{-i\hat{H}(\tau-t)/\hbar} \left(\frac{-i}{\hbar}\right) [\hat{H}, \hat{F}_0] e^{i\hat{H}(\tau-t)/\hbar} \\
 &= \int d\tau' (\tau' + t) e^{-i\hat{H}\tau'/\hbar} \left(\frac{-i}{\hbar}\right) [\hat{H}, \hat{F}_0] e^{i\hat{H}\tau'/\hbar} \\
 &= \int d\tau' \tau' e^{-i\hat{H}\tau'/\hbar} \left(\frac{-i}{\hbar}\right) [\hat{H}, \hat{F}_0] e^{i\hat{H}\tau'/\hbar} \\
 &+ t \int d\tau' e^{-i\hat{H}\tau'/\hbar} \left(\frac{-i}{\hbar}\right) [\hat{H}, \hat{F}_0] e^{i\hat{H}\tau'/\hbar} \\
 &= \int d\tau' \tau' e^{-i\hat{H}\tau'/\hbar} \hat{\Pi}_0 e^{i\hat{H}\tau'/\hbar} + t \\
 &= \hat{T} + t,
 \end{aligned}$$

Donde se ha tenido en cuenta que la integral del segundo sumando es igual a uno.

Obtención de la Ec. (5.16)

Podemos escribir

$$\begin{aligned}
 -i\hbar \langle \psi | \partial_E | \psi \rangle &= -i\hbar \int dE \langle \psi | \partial_E | E_\varphi \rangle \langle E_\varphi | \psi \rangle \\
 &= -i\hbar \langle \psi | \int dE \partial_E | E \rangle \langle E | \psi \rangle + \hbar \langle \psi | \int dE \varphi'(E) | E \rangle \langle E | \psi \rangle \\
 &= -i\hbar \langle \psi | \partial_E | \psi \rangle + \hbar \langle \psi | \int dE \varphi'(E) | E \rangle \langle E | \psi \rangle \\
 &= \langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle + \hbar \langle \psi | \int dE \varphi'(E) | E \rangle \langle E | \psi \rangle,
 \end{aligned}$$

de donde, el desplazamiento del operador canónico de tiempo toma la forma $\hbar \int dE \varphi'(E) | E \rangle \langle E |$.

Obtención de la Ec. (5.26)

El valor medio es

$$\begin{aligned}
\langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt t \langle \psi | e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{\Pi}_0 e^{i\hat{H}t/\hbar} | \psi \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dt t \langle \psi | e^{-i\hat{H}t/\hbar} \left(\frac{1}{\hbar} \sum_i \int dE \int dE' b_i(E) |E\rangle \overline{b_i(E')} \langle E'| \right) e^{i\hat{H}t/\hbar} | \psi \rangle \\
&= \frac{1}{\hbar} \sum_i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int dE \int dE' \left(\frac{\hbar}{-i} \right) \partial_E (e^{-i(E-E')t/\hbar}) b_i(E) \overline{\psi(E)} \psi(E') \overline{b_i(E')} \\
&= \frac{1}{\hbar} \sum_i \int dE \int dE' \left(\frac{\hbar}{-i} \right) \partial_E \left(\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-i(E-E')t/\hbar} \right) b_i(E) \overline{\psi(E)} \psi(E') \overline{b_i(E')} \\
&= \frac{\hbar}{-i} \sum_i \int dE \int dE' \frac{\partial}{\partial E} \delta(E - E') b_i(E) \overline{\psi(E)} \psi(E') \overline{b_i(E')}.
\end{aligned}$$

Ahora, integrando por partes,

$$\begin{aligned}
u &= b_i(E) \overline{\psi(E)}, & du &= \left(b'_i(E) \overline{\psi(E)} + b_i(E) \overline{\psi'(E)} \right), \\
dv &= \frac{\partial}{\partial E} \delta(E - E') dE, & v &= \int dE' \frac{\partial}{\partial E} \delta(E - E') = \delta(E - E'),
\end{aligned}$$

e imponiendo la condición de que $\psi(E) \rightarrow 0$ cuando $E \rightarrow \pm\infty$, se tiene

$$\begin{aligned}
\langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle &= \frac{\hbar}{i} \sum_i \int dE \int dE' \left(b'_i(E) \overline{\psi(E)} + b_i(E) \overline{\psi'(E)} \right) \delta(E - E') \psi(E') \overline{b_i(E')} \\
&= \frac{\hbar}{i} \sum_i \int dE' b'_i(E') \overline{\psi(E')} \psi(E') \overline{b_i(E')} \\
&+ \frac{\hbar}{i} \sum_i \int dE' b_i(E') \overline{\psi'(E')} \psi(E') \overline{b_i(E')}.
\end{aligned}$$

Recordando que $\sum_i b_i(E) \overline{b_i(E)} = 1$, finalmente nos queda

$$\langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \int dE' \overline{\psi(E')} \psi(E') + \frac{\hbar}{i} \sum_i \int dE' |\psi(E')|^2 \overline{b_i(E')} b_i(E').$$

Utilización de la Ec. (5.30) en la comprobación de la Ec. (5.25)

La suma sobre i da la unidad,

$$\begin{aligned}
\sum_i b_i(E) \overline{b_i(E)} &= \sum_i h^2 \langle E | \hat{\Pi}_0 | g_i \rangle \langle g_i | \hat{\Pi}_0 | E \rangle \\
&= \sum_i \sum_j \sum_k h^2 \langle E | g_j \rangle \langle g_j | \hat{\Pi}_0 | g_i \rangle \langle g_i | \hat{\Pi}_0 | g_k \rangle \langle g_k | E \rangle \\
&= \sum_i \sum_j \sum_k h^2 \langle E | g_j \rangle \frac{\delta_{ji}}{h} \frac{\delta_{ik}}{h} \langle g_k | E \rangle \\
&= \sum_i \sum_k \langle E | g_i \rangle \delta_{ik} \langle g_k | E \rangle = \sum_i \langle E | g_i \rangle \langle g_i | E \rangle \\
&= \langle E | E \rangle = 1.
\end{aligned}$$

Aclaraciones de las Figuras (6.2) y (6.3)

Hay que tener en cuenta las siguientes relaciones que provienen de la utilización de los operadores de Møller,

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \hat{\Omega}_\pm |\psi_{in}\rangle, \\
\hat{S} &= \hat{\Omega}_-^\dagger \hat{\Omega}_+, \\
|\psi_{out}\rangle &= \hat{S} |\psi_{in}\rangle, \\
|E_\pm\rangle &= \hat{\Omega}_\pm |E_f\rangle, \\
|\psi_{io}\rangle &= \hat{\Omega}_\Theta^\dagger |\psi\rangle, \\
|\psi_{io}\rangle &= \hat{S}^{1/2} |\psi_{in}\rangle.
\end{aligned}$$

A partir de aquí, se pueden calcular las distribuciones $\hat{\Pi}_{in}^A$, $\hat{\Pi}_{out}^A$ y $\hat{\Pi}_{io}^A$,

$$\begin{aligned}
\hat{\Pi}_{in}^A &= \left| \int_0^{+\infty} dE \frac{e^{-iEt}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle E_+ | \psi \rangle \right|^2 = \left| \int_0^{+\infty} dE \frac{e^{-iEt}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle E_f | \hat{\Omega}_+^\dagger \hat{\Omega}_+ | \psi_{in} \rangle \right|^2 \\
&= \left| \int_0^{+\infty} dE \frac{e^{-iEt}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle E_f | \psi_{in} \rangle \right|^2,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{\Pi}_{out}^A &= \left| \int_0^{+\infty} dE \frac{e^{-iEt}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle E_- | \psi \rangle \right|^2 = \left| \int_0^{+\infty} dE \frac{e^{-iEt}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle E_f | \hat{\Omega}_-^\dagger \hat{\Omega}_+ | \psi_{in} \rangle \right|^2 \\
&= \left| \int_0^{+\infty} dE \frac{e^{-iEt}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle E_f | \psi_{out} \rangle \right|^2,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{\Pi}_{io}^A &= \left| \int_0^{+\infty} dE \frac{e^{-iEt}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle E_\Theta | \psi \rangle \right|^2 = \left| \int_0^{+\infty} dE \frac{e^{-iEt}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle E_+ | \hat{S}^{1/2} | \psi \rangle \right|^2 \\
&= \left| \int_0^{+\infty} dE \frac{e^{-iEt}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle E_f | \hat{\Omega}_+^\dagger (\hat{\Omega}_+ \hat{\Omega}_+^\dagger)^{1/2} \hat{\Omega}_+ | \psi_{in} \rangle \right|^2 \\
&= \left| \int_0^{+\infty} dE \frac{e^{-iEt}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle E_f | (\hat{\Omega}_+^\dagger \hat{\Omega}_+^\dagger \hat{\Omega}_+ \hat{\Omega}_+^\dagger \hat{\Omega}_+ \hat{\Omega}_+^\dagger)^{1/2} | \psi_{in} \rangle \right|^2 \\
&= \left| \int_0^{+\infty} dE \frac{e^{-iEt}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle E_f | (\hat{\Omega}_+^\dagger \hat{\Omega}_+)^{1/2} | \psi_{in} \rangle \right|^2 \\
&= \left| \int_0^{+\infty} dE \frac{e^{-iEt}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle E_f | \psi_\Theta \rangle \right|^2.
\end{aligned}$$

Relación entre \hat{H} y \hat{H}_0

Si tenemos que $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, siendo \hat{H}_0 el Hamiltoniano de una partícula libre y utilizando la definición $\hat{\Omega}_\pm = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} e^{i\hat{H}t/\hbar} e^{-i\hat{H}_0t/\hbar}$, se puede escribir

$$\begin{aligned}
e^{i\hat{H}\tau/\hbar} \hat{\Omega}_\pm &= e^{i\hat{H}\tau/\hbar} \left(\lim_{t \rightarrow \mp\infty} e^{i\hat{H}t/\hbar} e^{-i\hat{H}_0t/\hbar} \right) = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} (e^{i\hat{H}(t+\tau)/\hbar} e^{-i\hat{H}_0t/\hbar}) \\
&= \lim_{t \rightarrow \mp\infty} (e^{i\hat{H}(t+\tau)/\hbar} e^{-i\hat{H}_0(t+\tau)/\hbar}) e^{i\hat{H}_0\tau/\hbar} = \hat{\Omega}_\pm e^{i\hat{H}_0\tau/\hbar}.
\end{aligned}$$

Ahora, derivando respecto a τ ambas partes de la igualdad,

$$i\hat{H} e^{i\hat{H}\tau/\hbar} \hat{\Omega}_\pm = \hat{\Omega}_\pm i\hat{H}_0 e^{i\hat{H}_0\tau/\hbar},$$

y haciendo $\tau = 0$, finalmente se tiene que

$$\hat{H} \hat{\Omega}_\pm = \hat{\Omega}_\pm \hat{H}_0.$$

Por otro lado, aprovechando la propiedad $\hat{\Omega}^\dagger \hat{\Omega} = 1$, esto último se puede expresar como

$$\hat{\Omega}_\pm^\dagger \hat{H} \hat{\Omega}_\pm = \hat{H}_0.$$

Relación de conmutación entre \hat{S} y \hat{H}_0

Utilizando la relación obtenida en el último apartado entre \hat{H} y \hat{H}_0 , aprovechando la propiedad $\hat{\Omega}^\dagger \hat{\Omega} = 1$ y la definición $\hat{S} = \hat{\Omega}_-^\dagger \hat{\Omega}_+$, escribimos

$$\hat{S} \hat{H}_0 = \hat{\Omega}_-^\dagger \hat{\Omega}_+ \hat{H}_0 = \hat{\Omega}_-^\dagger \hat{H} \hat{\Omega}_+ = \hat{\Omega}_-^\dagger \hat{H} \hat{\Omega}_- \hat{\Omega}_-^\dagger \hat{\Omega}_+ = \hat{H}_0 \hat{S}.$$

Partícula libre en el semi-espacio

Consideramos el movimiento libre en un semi-espacio $x \geq 0$, con condiciones de contorno reflectantes en $x = 0$. La ecuación de Schrödinger es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_k(x)}{\partial x^2} = E \psi_k(x).$$

Utilizando las condiciones de contorno mencionadas, $\psi_k(0) = 0$, resulta

$$\psi_k(x) = iC(e^{ikx} - e^{-ikx}).$$

Normalizando, tenemos que

$$\int_0^\infty dx \psi_k^*(x) \psi_k(x) = 1 \rightarrow C = \sqrt{\frac{2}{\pi}}.$$

De todo esto, en la representación de momentos

$$\psi_k(x) = i\sqrt{\frac{2}{\pi}}(e^{ikx} - e^{-ikx}),$$

y finalmente, pasando a la representación de energías obtenemos la expresión de la Ec. (5.48)

$$\langle x|E_f\rangle = \psi_E(x) = \frac{i}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2\pi k}}(e^{ikx} - e^{-ikx}).$$

Obtención de la Ec. (6.4)

Podemos escribir la ecuación de Schrödinger dimensional como

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(X, T)}{\partial T} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \Psi(X, T)}{\partial X^2}.$$

Utilizando la regla de la cadena para las derivadas,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi(X, T)}{\partial T} &= \frac{\partial \Psi(X, T)}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial T}, \\ \frac{\partial \Psi(X, T)}{\partial X} &= \frac{\partial \Psi(X, T)}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial X}, \end{aligned}$$

podemos escribir la ecuación de Schrödinger en forma adimensional como

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

que representa la ecuación de movimiento de una partícula de $m = 1/2$ con $\hbar = 1$.

Obtención de la Ec. (6.7)

La fuente en $x = 0$ se define como

$$\psi(0, t) = e^{-i\omega_0 t} \Theta(t), \quad \omega_{0R} > 0, \omega_{0I} < 0.$$

Según las ecuaciones de la dinámica cuántica $|\psi_t\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi_0\rangle$, con lo que

$$\begin{aligned} \langle x|\psi_t\rangle &= \psi(x, t) = \langle x|e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi_0\rangle = \int dE \langle x|e^{-iEt}|E\rangle \langle E|\psi_0\rangle \\ &= \int dE e^{-iEt} e^{i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x} \psi_0(E). \end{aligned}$$

Haciendo $m = \hbar = 1$ y $E = \omega$,

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} e^{i\sqrt{\omega}x} \psi_0(\omega).$$

Utilizando las condiciones de frontera

$$\psi(0, t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \psi_0(\omega) = e^{-i\omega_0 t} \Theta(t),$$

y ahora la transformada de Fourier

$$\psi_0(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \psi(0, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} e^{-i\omega_0 t} \Theta(t) = \frac{i}{2\pi(\omega - \omega_0)}.$$

Reuniendo todo nos queda

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} e^{i\sqrt{\omega}x} \frac{i}{2\pi(\omega - \omega_0)}.$$

Para facilitar la integración, pasamos al espacio de momentos $k = \sqrt{\omega}$ y $k_0 = \sqrt{\omega_0}$ cuyo límite de integración es ahora el contorno Γ_+ cuyos límites son $k = i\infty$ y $k = \infty$. Esta integral compleja tiene dos polos simples en $k = k_0$ y $k = -k_0$,

$$\psi(x, t) = \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_+} dk e^{-ik^2 t} e^{ikx} \left(\frac{1}{(k - k_0)} + \frac{1}{(k + k_0)} \right).$$

Completando el cuadrado de la función exponencial del interior de la integral $-i(k^2 t - kx) = -it(k - \frac{x}{2t})^2 + it\frac{x^2}{4t^2}$, haciendo $k_s = x/2t$, $\tau = x/2k_0$ y $\operatorname{erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^{\infty} dt e^{-t^2}$, nos queda finalmente que

$$\psi(x, t) = \frac{1}{2} e^{ik_s^2 t} \left[w(-u_0^{(+)}) + w(-u_0^{(-)}) \right],$$

donde $w(z) := e^{-z^2} \operatorname{erfc}(-iz)$ y $u_0^{(\pm)} = \pm(1+i)\sqrt{t/2}k_0(1 \mp \tau/t)$.

Obtención de las Ecs. (6.13) y (6.14)

Partiendo de la expresión que conduce a la Ec. (6.7),

$$\psi(x, t) = \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_+} dk e^{-ik^2 t} e^{ikx} \left(\frac{1}{(k - k_0)} + \frac{1}{(k + k_0)} \right),$$

haciendo un cambio de variable, véase [41],

$$\begin{aligned} k &= \frac{x}{t} s, \\ dk &= \frac{x}{t} ds, \end{aligned}$$

tal que $-i(k^2 t - kx) = -i \frac{x^2}{t} (s^2 - s)$, se puede poner la integral de partida como

$$\psi(x, t) = \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_+} ds \frac{x}{t} e^{-i \frac{x^2}{t} (s^2 - s)} \left(\frac{1}{\frac{x}{t} s - k_0} + \frac{1}{\frac{x}{t} s + k_0} \right).$$

Cambiando la notación

$$\begin{aligned} r &= \frac{x^2}{t}, \\ f(s) &= -i(s^2 - s), \\ F(s) &= \left(\frac{1}{\frac{x}{t} s - k_0} + \frac{1}{\frac{x}{t} s + k_0} \right), \end{aligned}$$

y usando el camino descendente con máxima pendiente (SDP), el punto-silla se encuentra en $f'(s) = 0 \rightarrow -i(2s - 1) = 0 \rightarrow s_d = 1/2$ y los $(m + 1)$ SDP se definen como $\theta_{SDP} = \frac{2n+1}{m+1}\pi - \frac{b}{m+1}$, $n = 0, 1, 2, \dots, m$ ($m + 1$ es el grado de la serie de Taylor para $f(s)$).

Como $f(s)$ se puede poner en forma de desarrollo de Taylor, $f(s) = -i[-1/2 + (s - 1/2)^2]$, se tiene que $m = 1$, y $f^{(1+1)}/(1+1)! = a e^{ib} = -i = e^{i3/2\pi}$ con lo que $a = 1$ y $b = 3/2\pi$. Por ello la orientación de los caminos de integración coincide con $\theta_{SDP} = -45^\circ (n = 0)$ y $\theta_{SDP} = 135^\circ (n = 1)$.

Con esto, la integral sobre el contorno Γ_+ será la suma de los caminos SPD, que llamaremos I_c , más la contribución de los polos.

Contribución del punto-silla

$$I_c = F(z_0) \frac{e^{rf(z_0)}}{r^{1/2}} \sqrt{\frac{2\pi}{-f''(z_0)}} \frac{x}{t} \quad (m = 1).$$

Siendo $z_0 = s_d = 1/2 \rightarrow k_s = \frac{x}{2t}$, $r = \frac{x^2}{t}$, $f(s_d) = i/4$, $f''(z_0) = f''(s_d) = -2i$ y $F(z_0) = F(s_d) = \left(\frac{1}{\frac{1}{2}\frac{x}{t} - k_0} + \frac{1}{\frac{1}{2}\frac{x}{t} + k_0} \right)$ nos queda

$$\begin{aligned} I_c &= e^{ik_s^2 t} \frac{\sqrt{t\pi}}{\sqrt{x^2} e^{\pi/4i}} \left(\frac{1}{\frac{1}{2}\frac{x}{t} - k_0} + \frac{1}{\frac{1}{2}\frac{x}{t} + k_0} \right) \frac{x}{t} \\ &= e^{ik_s^2 t} \frac{\sqrt{t\pi}}{\sqrt{x^2} (1+i)k_0} \left(\frac{1}{\frac{x}{2k_0 t} - 1} + \frac{1}{\frac{x}{2k_0 t} + 1} \right) \frac{x}{t}. \end{aligned}$$

Haciendo el cambio $\tau = x/2k_0$,

$$\begin{aligned} I_c &= e^{ik_s^2 t} \frac{\sqrt{t\pi}}{\sqrt{x^2} (1+i)k_0} \left(\frac{1}{\frac{\tau}{t} - 1} + \frac{1}{\frac{\tau}{t} + 1} \right) \frac{x}{t} \\ &= e^{ik_s^2 t} \frac{\sqrt{t\pi}}{\sqrt{x^2} (1+i)k_0} \left[\frac{(\frac{\tau}{t} - 1) + (\frac{\tau}{t} + 1)}{(\frac{\tau}{t} - 1)(\frac{\tau}{t} + 1)} \right] \frac{x}{t} \\ &= 2e^{ik_s^2 t} \frac{\sqrt{t\pi}\tau}{(1+i)k_0(\tau^2 - t^2)}, \end{aligned}$$

y, finalmente, incluyendo el factor $\frac{i}{2\pi}$ nos queda

$$\psi_s(x, t) = \frac{i}{2\pi} I_c = \frac{(2t/\pi)^{1/2} \tau e^{ik_s^2 t}}{[(i-1)k_0(t^2 - \tau^2)]}.$$

Contribución del polo

Para estimar esta contribución, se calcula la integral compleja evaluando el residuo en la expresión inicial, teniendo en cuenta el polo, k_0 , que está situado en el cuarto cuadrante,

$$\psi_0(x, t) = \frac{i}{2\pi} (-2\pi i \text{Res}(k_0)) = e^{-ik_0^2 t} e^{ik_0 x} = e^{-i\omega_0 t} e^{ik_0 x}.$$

Sumando ambas contribuciones se obtiene el resultado deseado.

Bibliografía

- [1] Y. Aharonov, J. Oppenheim, S. Popescu, B. Reznik, y W. G. Unruh, Phys. Rev. A **57**, 4130 (1998).
- [2] D. Alonso, R. Sala Mayato, J. G. Muga, Phys. Rev. A **67**, 032105 (2003).
En este artículo se afirma incorrectamente que las distribuciones de \hat{T}_D y \hat{t}_D coinciden, véanse sus dos últimas ecuaciones y el párrafo relacionado.
- [3] Y. Ban, E. Ya Sherman, J. G. Muga y M. Büttiker, Phys. Rev. A **82**, 062121 (2010).
- [4] T. Bastin y J. Martin, Phys. Rev. A **67**, 053804 (2003).
- [5] A. D. Baute, I. L. Egusquiza y J. G. Muga, Phys. Rev. A **64**, 012501 (2001).
- [6] A. D. Baute, R. Sala Mayato, J. P. Palao, J. G. Muga, y I. Egusquiza, Phys. Rev. A **61**, 022118 (2000).
- [7] A. Baz', Sov. J. Nucl. Phys. **4**, 182 (1967).
- [8] S. Bize et al., J. Phys. B **38**, S449 (2005).
- [9] S. Boonchui y V. Sa-yakanit, Phys. Rev. **77**, 044101 (2008).
- [10] C. Bracher, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **30**, 2717 (1997).
- [11] S. Brouard, R. Sala, y J. G. Muga, Phys. Rev. A **49**, 4312. (1994)
- [12] C. Brukner y A. Zeilinger, Phys. Rev. A **56**, 3804 (1997).
- [13] M. Büttiker, Phys. Rev. A **27**, 6178 (1983).
- [14] M. Büttiker, Lect. Notes Phys. **734**, 279 (2008).
- [15] M. Büttiker, R. Landauer, Phys. Rev. Lett. **49**, 1739 (1982).

-
- [16] M. Büttiker, H. Thomas, y A. Prêtre, Phys. Lett. A. **180**, 364 (1993).
- [17] A. del Campo, G. García-Calderón y J. G. Muga, Phys. Rep. **476**, 1 (2009).
- [18] A. del Campo, J. G. Muga, y M. Moshinsky, J. Phys. B **40** 975 (2007).
- [19] C. A. A. de Carvalho y H. M. Nussenzveig, Phys. Rep. **364**, 83 (2002).
- [20] A. Casher y B. Reznik, Phys. Rev. A **62**, 042104 (2000).
- [21] Y. Colombe, B. Mercier, H. Perrin, y V. Lorent, Phys. Rev. A **72**, 061601 (2005).
- [22] J. A. Damborenea, I. L. Egusquiza, G. C. Hegerfeldt, y J. G. Muga, Phys. Rev. A **66**, 052104 (2002).
- [23] J. A. Damborenea, I. L. Egusquiza, y J. G. Muga, J. Am. Phys. **70**, 738 (2002).
- [24] J. A. Damborenea, I. L. Egusquiza, J. G. Muga, y B. Navarro, arXiv:quant-ph/0403081 (2004).
- [25] G. Della Valle *et al.*, Appl. Phys. Lett. **90**, 261118 (2007).
- [26] I. L. Egusquiza, J. G. Muga, y A. D. Baute: en *Time in Quantum Mechanics, Vol. 1*, ed. por J. G. Muga, R. Sala, y I. Egusquiza (Springer, Berlin, 2008), Cap. 10.
- [27] H. Ekstein y A. J. F. Siegert, Ann. Phys. **68**, 509 (1971).
- [28] H. A. Fertig, Phys. Rev. Lett. **65**, 2321 (1990).
- [29] E. A. Galapon, Int. J. Mod. Phys. A **21**, 6351 (2006).
- [30] E. A. Galapon y A. Villanueva, J. Phys. A:Math. Theor. **41**, 455302 (2008).
- [31] E. A. Galapon, Lect. Notes Phys. **789**, 25 (2009), y referencias contenidas en él.
- [32] G. García-Calderón y J. Villavicencio, Phys. Rev. A **64**, 012107 (2001).
- [33] S. Godoy, Phys. Rev. A **67**, 012102 (2003).
- [34] S. Godoy, Physica B **404**, 1826 (2009).

- [35] M. L. Goldberger y K. M. Watson, *Collision theory* (Krieger, Huntington, 1975).
- [36] R. Golub, S. Felber, R. Gähler, y E. Gutsmedl, Phys. Lett. A **148**, 27 (1990).
- [37] M. J. W. Hall, J. Phys. A **41**, 255301 (2008).
- [38] M. J. W. Hall, eprint arXiv:0802.2682.
- [39] J. J. Halliwell y J. M. Yearsley, arXiv:0903.1957.
- [40] E. H. Hauge y J. A. Støvneng, Rev. Mod. Phys. **61**, 917 (1989).
- [41] S. I. Hayek, *Advanced Mathematical Methods in Science and Engineering*, Marcel Dekker, Inc., New York, (2001).
- [42] G. C. Hegerfeldt y J. G. Muga, J. Phys. A: Math. Gen. **43**, 505303 (2010).
- [43] G. C. Hegerfeldt, J. G. Muga, y J. Muñoz, Phys. Rev. A **82**, 012113 (2010).
- [44] G. C. Hegerfeldt, D. Seidel, J. G. Muga, y B. Navarro, Phys. Rev. A **70**, 012110 (2004).
- [45] W. Heisenberg, Zeitschrift für Physik **43**, 172 (1927). Traducido en *Quantum Theory and Measurement*, ed. por J. A. Wheeler, W. H. Zurek (Princeton University Press, Princeton 1983).
- [46] Th. Hils *et al.* Phys. Rev. A **58**, 4784 (1998).
- [47] A. S. Holevo, *Probabilistic and statistical aspects of quantum theory*, North Holland, Amsterdam, 1982.
- [48] Z. Huang y C. M. Wang, J. Phys.: Cond. Matt **3**, 5915 (1991).
- [49] W. Jaworski y D. M. Wardlaw, Phys. Rev. A **37**, 2843 (1988).
- [50] W. Jaworski y D. M. Wardlaw, Phys. Rev. A **40**, 6210 (1989).
- [51] N. G. Kelkar, Phys. Rev. Lett. **99**, 210403 (2007).
- [52] J. Kijowski, Rep. Math. Phys. **6**, 362 (1974).
- [53] M. Kleber, Phys. Rep. **236**, 331 (1994).

- [54] V. V. Kocharovsky, Vl. V. Kocharovsky, y M. O. Scully, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2306 (2000).
- [55] R. Landauer y T. Martin, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 217 (1994).
- [56] Ph. Laurent et al., *Eur. Phys. J. D* **3**, 201 (1998); Ch. Salomon et al., *C. R. Acad. Sci. Paris Série IV* **2**, 1313 (2001).
- [57] C. R. Leavens, *Solid State Commun.* **86**, 781 (1993).
- [58] C. R. Leavens y W. R. McKinnon, *Phys. Lett.* **194**, 12 (1994).
- [59] C. R. Leavens y R. Sala Mayato, *Ann. Phys. Leipzig* **7**, 662 (1998).
- [60] J. León, J. Julve, P. Pitanga, y F. J. de Urriés, *Phys. Rev. A* **61**, 062101 (2000).
- [61] H. Lewenkopf y R. O. Vallejos, *Phys. Rev. E* **70**, 036214 (2004).
- [62] I. Lizuain, S. V. Mousavi, D. Seidel, y J. G. Muga, *Phys. Rev. A* **78**, 013633 (2008).
- [63] I. Lizuain, J. G. Muga, y J. Eschner, *Phys. Rev. A* **76**, 033808 (2007).
- [64] V. Man'ko, M. Moshinsky, y A. Sharma, *Phys. Rev. A* **59**, 1809 (1999).
- [65] J. D. Miller, R. A. Cline, y D. J. Heinzen, *Phys. Rev. A* **47**, R4567 (1993).
- [66] W. H. Miller, S. D. Schwartz, y J. W. Tromp, *J. Chem. Phys.* **79**, 4889 (1983).
- [67] G. Monsivais, M. Moshinsky, y G. Loyola, *Phys. Scrip.* **54**, 216 (1996).
- [68] M. Moshinsky, *Phys. Rev.* **88**, 625 (1952).
- [69] S. V. Mousavi, A. del Campo, I. Lizuain, y J. G. Muga, *Phys. Rev. A* **76**, 033607 (2007).
- [70] J. G. Muga en *Time in Quantum Mechanics, Vol. 1*, ed. por J. G. Muga, R. Sala y I. Egusquiza (Springer, Berlin, 2008), Cap. 2.
- [71] J. G. Muga, S. Brouard, y R. Sala, *Phys. Lett. A* **167**, 24 (1992).
- [72] J. G. Muga, S. Brouard, y R. Sala, *J. Phys.: Cond. Matt.* **4**, L579 (1992).
- [73] J. G. Muga, V. Delgado, y R. F. Snider, *Phys. Rev.* **52**, 16381 (1995).

- [74] J. G. Muga, J. Echanobe, A. del Campo, y I. Lizuain, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **41**, 175501 (2008).
- [75] J. G. Muga y C. R. Leavens, *Phys. Rep.* **338**, 353 (2000).
- [76] J. G. Muga, A. Ruschhaupt and A. del Campo, *Time in Quantum Mechanics*, Vol. 2, *Lect. Notes Phys.* **789**, Springer-Verlag, Berlin 2009.
- [77] J. G. Muga, R. Sala Mayato y I. L. Egusquiza (eds.), *Time in Quantum Mechanics*, Vol. 1, *Lect. Notes Phys.* **734**, Springer-Verlag, Berlin 2008.
- [78] J. G. Muga y D. Wardlaw, *Phys. Rev. E* **51**, 5377 (1995).
- [79] J. Muñoz, I. L. Egusquiza, A. del Campo, D. Seidel, y J. G. Muga, *Lect. Notes Phys.* **789**, 97 (2009).
- [80] J. Muñoz, I. Lizuain, y J. G. Muga, *Phys. Rev. A* **80**, 022116 (2009).
- [81] J. Muñoz, D. Seidel, y J. G. Muga, *Phys. Rev. A* **79**, 012108 (2009).
- [82] B. Navarro, I. L. Egusquiza, J. G. Muga, y G. C. Hegerfeldt, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **36**, 3899 (2003).
- [83] B. Navarro, I. L. Egusquiza, J. G. Muga, y G. C. Hegerfeldt, *Phys. Rev. A* **67**, 063819 (2003).
- [84] J. V. Neumann, *Mathematical Foundations of quantum mechanics* (Princeton University Press, 1955).
- [85] J. P. Palao, J. G. Muga, S. Brouard, y A. Jadczyk, *Phys. Lett. A* **233**, 227 (1997).
- [86] W. Pauli in *Handbuch der Physik* (Springer, Berlin, 1933), vol. 34, pp. 83-272.
- [87] G. G. Paulus y D. Bauer, *Lect. Notes Phys.* **789**, 303 (2009).
- [88] A. Peres, *Am. J. Phys.* **48**, 552 (1980).
- [89] A. Peres, *Quantum Theory: Concepts and Methods*, Kluwer Academic, New York, (1995), Chap. 12.
- [90] E. Pollak y W. H. Miller, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 115 (1984).
- [91] A. Ruschhaupt, *Phys. Lett. A* **250**, 249 (1998).

- [92] A. Ruschhaupt, J. A. Damborenea, B. Navarro, J. G. Muga, y G. C. Hegerfeldt, *Europhys. Lett.* **67**, 1 (2004).
- [93] A. Ruschhaupt y J. G. Muga, *Phys. Rev. A* **76**, 013619, (2007).
- [94] A. Ruschhaupt, J. G. Muga, y G. C. Hegerfeldt, *Lect. Not. Phys.* **789**, 65 (2009).
- [95] V. Rybachenko, *Sov. J. Nucl. Phys.* **5**, 635 (1967).
- [96] R. Sala Mayato, D. Alonso, y I. L. Egusquiza, *Lect. Notes Phys.* **734**, 235 (2008).
- [97] H. Salecker y E. P. Wigner, *Phys. Rev.* **109**, 571 (1958).
- [98] D. Schneble *et al.*, *J. Opt. Soc. Am. B* **20**, 648 (2003).
- [99] D. Seidel y J. G. Muga, *Eur. Phys. J. D* **41**, 71 (2007).
- [100] G. L. Sewell, *Quantum Mechanics and its Emergent Macrophysics*, Princeton University Press, Princeton and Oxford, 2002, p. 84.
- [101] F. T. Smith, *Phys. Rev.* **118**, 349 (1960).
- [102] D. Sokolovski, *Phys. Rev. A* **66**, 032107 (2002).
- [103] D. Sokolovski, *Proc. R. Soc. Lond. A* **460**, 1505 (2004).
- [104] D. Sokolovski, *Phys. Rev. A* **76**, 042125 (2007).
- [105] D. Sokolovski en *Time in Quantum Mechanics, Vol. 1*, ed. por J. G. Muga, R. Sala, y I. Egusquiza (Springer, Berlin, 2008), Chapter 7.
- [106] D. Sokolovski, *Phys. Rev. A* **81**, 042125 (2010).
- [107] D. Sokolovski, J. N. L. Connor, *Phys. Rev. A* **44**, 1500 (1991).
- [108] Y. Strauss, J. Silman, S. Machnes, L.P. Horwitz, eprint arXiv:0802.2448.
- [109] P. Szriftgiser, D. Guéry-Odelin, M. Arndt, y J. Dalibard, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4 (1996).
- [110] J. E. Thomas *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 867 (1982).
- [111] E. Torrontegui, J. G. Muga, J. Martorell, y D. W. L. Sprung, *Phys. Rev. A* **80**, 012703 (2009).

-
- [112] E. Torrontegui, J. G. Muga, J. Martorell, y D. W. L. Sprung, Phys. Rev. A **81**, 042714 (2010).
- [113] E. Torrontegui, J. G. Muga, J. Martorell, y D. W. L. Sprung, Adv. Quant. Chem. **60**, 485 (2010).
- [114] E. Torrontegui, J. Muñoz, Yue Ban, y J. G. Muga, arXiv:1011.4278, aceptado en Phys. Rev. A.
- [115] J. Vanier, Appl. Phys. B **81**, 421 (2005).
- [116] J. Vanier y C. Audoin, Metrologia **42**, S31 (2005).
- [117] R. Werner, J. Math. Phys. **27**, 793 (1986).
- [118] S. R. Wilkinson *et al.*, Nature **387**, 575 (1997).
- [119] H. G. Winful, Phys. Rep. **436**, 1 (2006).
- [120] R. G. Winter, Phys. Rev. **123**, 1503 (1961).
- [121] N. Yamada, Phys. Rev. Lett. **93**, 170401 (2004).
- [122] S. Zamith *et al.*, Phys. Rev. Lett. **87**, 033001 (2001).