

Capítulo 2

Decaimiento

En física tanto macroscópica como microscópica es muy común encontrarse con comportamientos que pueden ser descriptos por una ley de relajación exponencial. Como ejemplos del último se pueden citar el decaimiento de un átomo, la pérdida de magnetización en un experimento de Resonancia Magnética, etcétera. Existe una aproximación semiclásica, de gran éxito experimental, que da cuenta de estos comportamientos, es la conocida Regla de Oro de Fermi (ROF). Sin embargo, recientes experimentos han permitido observar sistemas donde las aproximaciones necesarias para la ROF no son válidas ([WBF⁺97], [PLU95], [MBSH⁺97]). Las interferencias cuánticas presentes en estos sistemas son el elemento clave que es imposible de describir mediante una aproximación semiclásica como la ROF. Estos experimentos justifican la búsqueda de sistemas modelo lo suficientemente simples como para resolver su dinámica cuántica exactamente, pero que conserven las propiedades que permiten que la ROF sea una buena aproximación en algún rango. En esta búsqueda se centra este capítulo.

2.1 La Regla de Oro de Fermi

Supongamos un estado aislado $|s\rangle$ acoplado a un baño (cuyos estados numeraremos como $|k\rangle$). Utilizando teoría de perturbaciones, la primera corrección a la energía del estado

$|s\rangle$ es

$$\Delta E_s = \sum_k \frac{|\langle k | \hat{V} | s \rangle|^2}{E_k - E_s^0}, \quad (2.1)$$

donde \hat{V} es el parámetro de acople entre el estado $|s\rangle$ y el baño. Si hacemos la aproximación de que el espectro del baño es continuo e infinito (aproximación de banda ancha), la corrección a la energía será

$$\Delta E_s = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|V_{ks}|^2}{E_k - E_s^0} N(E_k) dE_k, \quad (2.2)$$

donde $N(E_k)$ es la densidad de estados en el baño a la energía E_k y V_{ks} es el elemento de matriz del operador \hat{V} entre los estados $|k\rangle$ y $|s\rangle$. Esta integral se puede realizar mediante técnicas usuales en el análisis matemático de variable compleja. Se suma una pequeña parte imaginaria η a las energías, se integra sobre un contorno que no toque a los polos del integrando, se utiliza el teorema de Cauchy y se toma el límite de η tendiendo a cero. El resultado de esta operación es:

$$\Delta E_s = \mathfrak{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|V_{ks}|^2}{E_k - E_s^0} N(E_k) dE_k - \pi i \int_{-\infty}^{\infty} N(E_k) |V_{ks}|^2 \delta(E_k - E_s) dE_k. \quad (2.3)$$

Este resultado, matemáticamente exacto, tiene una gran implicancia en la dinámica del sistema en consideración. Una energía con una componente imaginaria hace que la probabilidad de encontrar al sistema en el mismo estado inicial decaiga exponencialmente con un tiempo característico igual al doble de la inversa de la parte imaginaria de la energía calculada en (2.3). Si llamamos a esta parte imaginaria Γ , tenemos que la función de onda para un tiempo t será

$$|s, t\rangle = e^{-i \frac{H(t-t_0)}{\hbar}} |s, t_0\rangle \simeq e^{-\frac{i}{\hbar} (E_s^0 + \Delta - i\Gamma)(t-t_0)} |s, t_0\rangle = e^{-\frac{\Gamma(t-t_0)}{\hbar}} e^{i\phi(t)} |s, t_0\rangle; \quad (2.4)$$

luego, la función de autocorrelación

$$P_{ss}(t - t_0) = | \langle s, t_0 | s, t \rangle |^2 = e^{-\frac{2\Gamma(t-t_0)}{\hbar}} = e^{-\frac{(t-t_0)}{\tau_F}} \quad (2.5)$$

con

$$\frac{1}{\tau_F} = \frac{2\Gamma}{\hbar} = \frac{2\pi}{\hbar} \int N(E_k) |V_{ks}|^2 \delta(E_k - E_s) dE_k, \quad (2.6)$$

donde τ_F es el llamado *tiempo de Fermi*, y (2.6) es la *Regla de Oro de Fermi*. Resaltamos ahora, porque será útil más tarde, que el tiempo de Fermi es el tiempo de decaimiento característico de la *probabilidad*, no de la función de onda.

Sin embargo, una energía imaginaria no puede ser una solución para la ecuación de Schrödinger, dado que el Hamiltoniano es un operador hermítico y estos sólo pueden tener autovalores reales. La energía imaginaria surgió por las aproximaciones realizadas y por el método utilizado para el cálculo. Todos los diferentes métodos para deducir la ROF contienen alguna suposición que lleva a una componente imaginaria de la energía. En este caso, el paso que nos saca del espacio de soluciones de la ecuación de Schrödinger es el sumar $i\eta$ a la energía E_s^0 . Esto es equivalente a poner en contacto el sistema con un ambiente que produce relajación, lo que lleva a una evolución no unitaria, o sea probabilidad que se pierde de nuestra descripción del sistema. Las aproximaciones de continuidad e infinitud del espectro tienen otras implicaciones que serán discutidas más adelante.

Nuestra búsqueda se orienta ahora a encontrar un sistema Hamiltoniano simple que, resuelto de manera exacta, muestre una dinámica que pueda describirse mediante la ROF.

2.2 Cadenas unidimensionales

El primer sistema con dinámica simple que podemos imaginar es un sistema cuántico de dos niveles con una interacción V entre ellos. La ecuación de Schrödinger correspondiente al sistema,

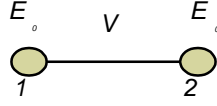


Figura 2-1: Esquema de un sistema de dos sitios acoplados entre sí.

$$H\phi = i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t}, \quad (2.7)$$

se puede escribir matricialmente de la siguiente manera

$$\begin{bmatrix} E_1 & V_{12} \\ V_{21} & E_2 \end{bmatrix} \phi = i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t}; \quad (2.8)$$

donde E_1 y E_2 son las energías correspondientes al estado 1 y 2 respectivamente. Supongamos ahora que el sistema en cuestión se puede representar como en la figura 2-1, donde hemos tomado $V = V_{12} = V_{21}$ y $E_0 = E_1 = E_2$.

El sistema graficado puede interpretarse como dos sitios o valles de potencial para una partícula conectados por una barrera de potencial V , o como dos núcleos magnéticos de spin 1/2 con interacción V a temperatura infinita con interacción XY . Si ponemos inicialmente en t_0 a la partícula en el primer sitio (o el spin hacia arriba) y resolvemos la ecuación de movimiento, encontramos que la probabilidad de encontrar a la partícula nuevamente en el sitio (función de autocorrelación) es

$$P_{11}(t - t_0) = \cos^2 \left(\frac{V(t - t_0)}{\hbar} \right), \quad (2.9)$$

que corresponde a la figura 2-2.

Hagamos ahora crecer el tamaño del sistema, suponiendo N átomos o sitios a distancia a entre ellos, con un potencial E_0 en cada sitio, conectados a primeros vecinos por un término cinético $V \simeq \hbar^2/2ma^2$ (en la aproximación de *tight binding*). El Hamiltoniano correspondiente a este sistema, escrito en el formalismo de los operadores creación y

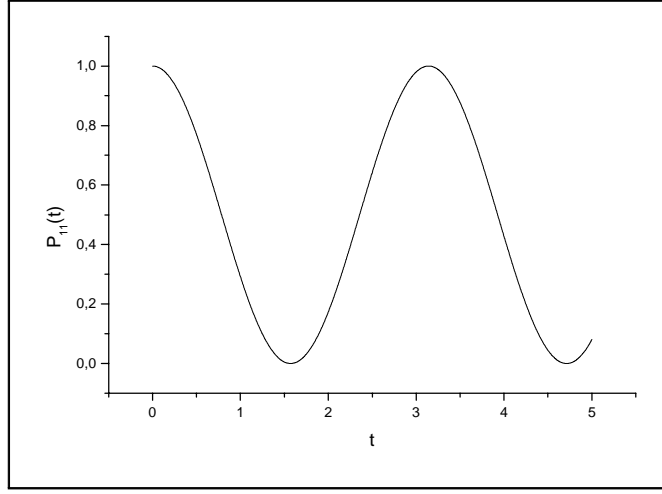


Figura 2-2: Probabilidad de volver a encontrar la partícula en el mismo sitio luego de un tiempo t para el sistema de dos sitios. t está expresado en unidades de $\frac{\hbar}{V}$.

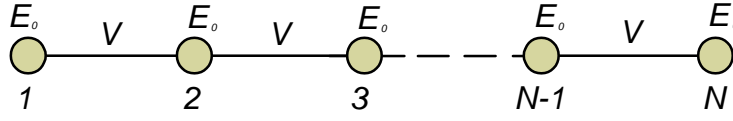


Figura 2-3: Esquema de una red unidimensional de N sitios o átomos para una partícula.

destrucción de partículas, es

$$H = \sum_{i=1}^N E_0 c_i^\dagger c_i + V (c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i), \quad (2.10)$$

y podemos representarlo mediante el esquema de la figura 2-3.

Suponiendo la partícula en el sitio 1 a tiempo $t_0 = 0$, nos preguntamos por la probabilidad de volver a encontrarla en el mismo sitio luego de un tiempo t . El resultado que se obtiene es típicamente lo que se observa en la figura 2-4. Nótese que siempre a un tiempo proporcional a N (en unidades de \hbar/V) la probabilidad resurge hasta un valor considerablemente alto. Este resurgimiento es efecto del tamaño finito del sistema, y se lo denomina *eco mesoscópico*. Efectos mesoscópicos se observan en sistemas de tamaño L

más pequeño que la *longitud de decoherencia* ℓ_ϕ en el cual se supone válida la aproximación del Hamiltoniano por (2.10). Esto permite que en estos sistemas se puedan observar propiedades físicas interesantes atribuibles a efectos de la interferencia cuántica.

El tiempo al cual ocurre el eco mesoscópico también se denomina tiempo de Heisenberg τ_H . Este tiempo es proporcional a la inversa de la frecuencia más baja involucrada en el sistema (diferencia de energías), y se puede dar una interpretación cualitativa. Considerémos un espectro suficientemente homogéneo como para que las diferencias de energías sean múltiplos de una mínima $\Delta\varepsilon$ (como en un oscilador armónico). En un tiempo un número entero de veces la inversa de esta frecuencia, la función de onda será exactamente la función de onda inicial. Si el espaciamiento de energía no es exacto, la amplitud del eco se verá disminuía. Otra manera alternativa de ver el tiempo de Heisenberg es pensar en que es el tiempo que le toma a un paquete de ondas reflejarse en la otra punta del sistema y volver. La velocidad del paquete será

$$v \simeq \frac{1}{\hbar} \frac{\Delta\varepsilon}{\Delta k} = \frac{1}{\hbar} \frac{\Delta\varepsilon}{\frac{2\pi}{L}}. \quad (2.11)$$

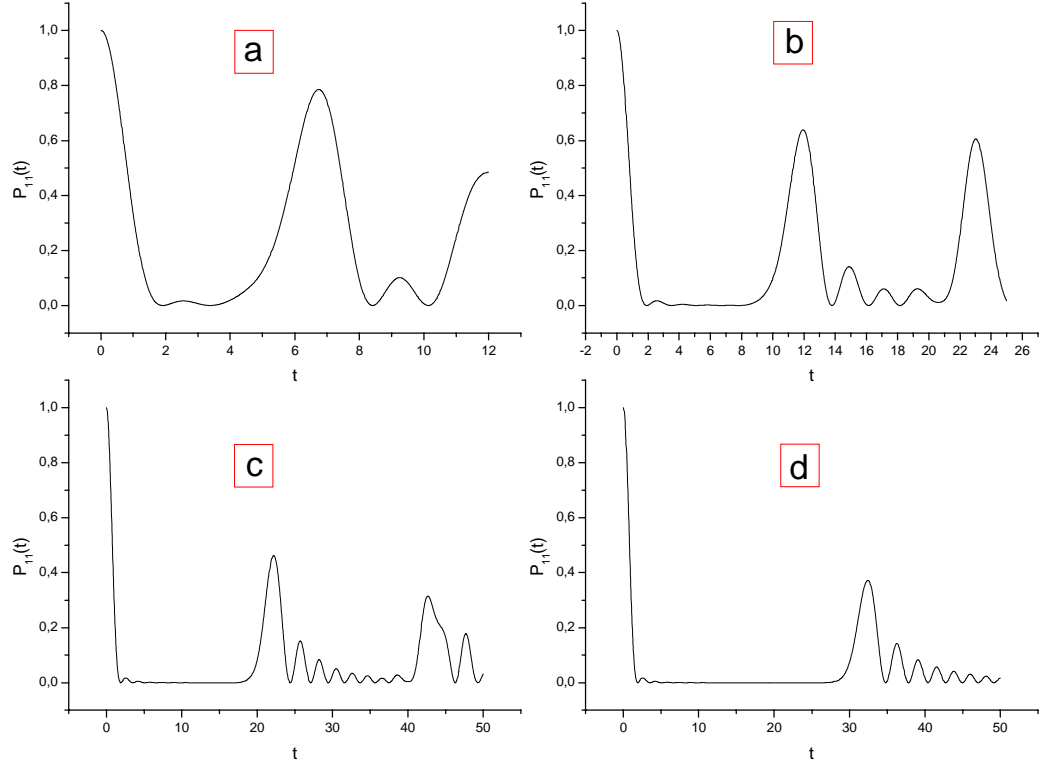
Despejando el tiempo de Heisenberg de $2L = v\tau_H$,

$$\tau_H \simeq \frac{4\pi\hbar}{\Delta\varepsilon}. \quad (2.12)$$

Si consideramos a un sistema con las energías aproximadamente equiespaciadas con una separación V/N , el tiempo de Heisenberg será aproximadamente

$$\tau_H \sim \frac{\hbar}{\Delta\varepsilon} \sim \frac{\hbar}{\frac{V}{N}} = \frac{N\hbar}{V}, \quad (2.13)$$

así vemos que el tiempo de Heisenberg es proporcional al tamaño del sistema. Un estudio analítico de las funciones de autocorrelación para sistemas de diferentes tamaños fué



Figura~2-4: Probabilidad de que una partícula vuelva al sitio inicial (1) luego de un tiempo t , para diferentes largos de cadenas (a) $N = 5$, (b) $N = 10$, (c) $N = 20$, (d) $N = 30$. Obsérvese que para un tiempo proporcional a N aparece un resurgimiento de la probabilidad inicial. El tiempo está en unidades de $\frac{\hbar}{V}$

realizado en [Usa95], donde se observó que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P_{11}(t) = \left(\frac{J_1 \left(\frac{2Vt}{\hbar} \right)}{\frac{Vt}{\hbar}} \right)^2, \quad (2.14)$$

donde J_1 es la función de Bessel de orden 1. En los gráficos de la figura 2-4 se puede ajustar con el valor predicho en el límite N infinito para tiempos menores al tiempo de Heisenberg.

La solución exacta, independiente del tiempo, del sistema con un Hamiltoniano como el 2.10 es posible mediante el teorema de Bloch. Las autofunciones del sistema son

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N |n\rangle e^{ikna}, \quad (2.15)$$

donde a es la constante de red y $|n\rangle$ son las autofunciones de Wannier en la base de sitio. Imponiendo las condiciones de contorno $\langle 0|k\rangle \equiv 0$ y $\langle N+1|k\rangle \equiv 0$, llegamos a que las autofunciones y sus autoenergías se pueden escribir como

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N+1}} \sum_{n=1}^N \sin(kna) \quad , \quad (2.16)$$

$$E(k) = E_0 + 2V \cos(ka), \quad (2.17)$$

$$\text{siendo } k = \frac{\pi s}{(N+1)a} \quad \text{y } s = 1, 2, \dots, N.$$

En el caso de $N \rightarrow \infty$, el espectro de energía del sistema es continuo y va desde $E_0 - 2V$ hasta $E_0 + 2V$. Para este caso, podemos ver que la densidad total de estados,

$$N_0(E_k) = \frac{dk}{dE} = \frac{1}{\frac{dE}{dk}} = \frac{1}{2Va \sqrt{1 - \left(\frac{E_k - E_0}{2V} \right)^2}} \quad (2.18)$$

, que tiene un mínimo en $E = E_0$ y divergencias en $E = 2V$ y $E = -2V$, tal como se puede ver en la figura 2-5. Este rango de energías se lo denomina usualmente *banda de estados permitidos*, o banda, dado que sólo existen estados en la cadena para estas

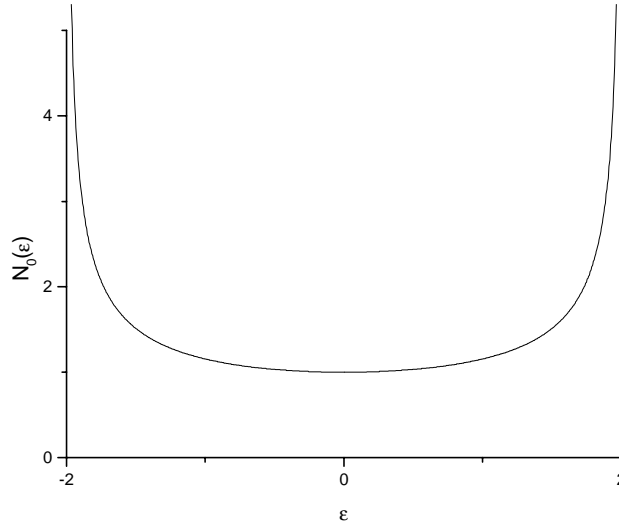


Figura 2-5: Densidad de estados local para una cadena tight-binding infinita, con $V = 1$, $a = 1$ y $E_0 = 0$

energías. Para continuar con el estudio de estos sistemas, es necesario introducir algunos nuevos conceptos que nos permitan obtener una solución más global.

2.3 La función de Green y las propiedades espectrales

Es posible realizar precisas correlaciones entre propiedades del espectro y propiedades de la dinámica en un sistema cuántico. Sin embargo el primero no resulta siempre simple de interpretar. Muchos comportamientos que mediante la dinámica se observan directamente se ocultan debajo de características del espectro difíciles de aislar. En la literatura es más usual encontrar estudios numéricos del espectro de los sistemas ya que estos son mucho menos costosos que el estudio de la dinámica.

Para entender algunas propiedades del espectro es necesario introducir el concepto de *función de Green*. Se incluye a continuación una presentación de algunos de los aspectos

de esta.

Si escribimos la ecuación de Schrödinger de manera vectorial,

$$\mathbf{H}\vec{u} = \varepsilon\vec{u} \Rightarrow (\varepsilon\mathbf{I} - \mathbf{H})\vec{u} = 0, \quad (2.19)$$

entonces puedo estudiar la ecuación $\det(\varepsilon\mathbf{I} - \mathbf{H}) = 0$ para encontrar los autovectores de H . Alternativamente, puedo estudiar el determinante de la inversa, $\det(\varepsilon\mathbf{I} - \mathbf{H})^{-1}$, y los puntos donde este tenga divergencias. Definimos luego la *resolvente de Green*,

$$G(\varepsilon) = (\varepsilon\mathbf{I} - \mathbf{H})^{-1}. \quad (2.20)$$

Como esta ecuación puede ser muy complicada, es muy interesante aplicar teoría de perturbaciones para resolverla. Supongamos por simplicidad un Hamiltoniano de tamaño 2 por 2, con una perturbación pequeña fuera de la diagonal, o sea

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}^0 + \mathbf{V} = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & V_{12} \\ V_{21} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.21)$$

La resolvente de Green para el Hamiltoniano sin perturbar es

$$\mathbf{G}^0 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\varepsilon - E_1} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\varepsilon - E_2} \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

Si ahora sumamos a ε una parte imaginaria η , pasamos del *resolvente* a la *función de Green*¹

$$\mathbf{G}^{0R}(\varepsilon) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\varepsilon + i\eta - E_1} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\varepsilon + i\eta - E_2} \end{pmatrix}. \quad (2.23)$$

Una propiedad importante de esta función de Green se puede ver haciendo el siguiente

¹La elección del signo de la parte imaginaria implica la elección del signo del tiempo que se va a observar. Más adelante se usará la expresión función de Green en todos los casos, teniendo en cuenta que esta elección se puede hacer en cualquier momento.

límite

$$-\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0} \text{Im } \mathbf{G}_{11}^{0R}(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{\eta}{(\varepsilon - E_1)^2 + \eta^2} = \delta(\varepsilon - E_1), \quad (2.24)$$

que es la densidad de estados de la energía 1. Se puede verificar que para cualquier sistema [Eco79]

$$N_0(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0} \text{Im Tr } G(\varepsilon + i\eta). \quad (2.25)$$

La función de Green para el sistema completo es

$$\mathbf{G}(\varepsilon) = \frac{1}{(\varepsilon - E_1)(\varepsilon - E_2) - V_{12}V_{21}} \begin{pmatrix} \varepsilon - E_2 & -V_{12} \\ -V_{21} & \varepsilon - E_1 \end{pmatrix}, \quad (2.26)$$

entonces

$$\mathbf{G}_{11}(\varepsilon) = \frac{(\varepsilon - E_2)}{(\varepsilon - E_1)(\varepsilon - E_2) - V_{12}V_{21}} = \frac{1}{(\varepsilon - E_1) - V_{12} \frac{1}{(\varepsilon - E_2)} V_{21}}. \quad (2.27)$$

Reordenando los términos para hacer una expansión en serie

$$\mathbf{G}_{11}(\varepsilon) = \frac{1}{[\mathbf{G}_{11}^0(\varepsilon)]^{-1} - V_{12} [\mathbf{G}_{22}^0(\varepsilon)] V_{21}} \quad (2.28)$$

$$\mathbf{G}_{11}(\varepsilon) = \mathbf{G}_{11}^0(\varepsilon) \frac{1}{1 - V_{12} \mathbf{G}_{22}^0(\varepsilon) V_{21} \mathbf{G}_{11}^0(\varepsilon)} \quad (2.29)$$

$$\mathbf{G}_{11}(\varepsilon) = \mathbf{G}_{11}^0(\varepsilon) (1 + V_{12} \mathbf{G}_{22}^0(\varepsilon) V_{21} \mathbf{G}_{11}^0(\varepsilon) +$$

$$V_{12} \mathbf{G}_{22}^0(\varepsilon) V_{21} \mathbf{G}_{11}^0(\varepsilon) \times V_{12} \mathbf{G}_{22}^0(\varepsilon) V_{21} \mathbf{G}_{11}^0(\varepsilon) + \dots \quad (2.30)$$

$$\mathbf{G}_{11}(\varepsilon) = \mathbf{G}_{11}^0(\varepsilon) + \mathbf{G}_{11}^0(\varepsilon) V_{12} \mathbf{G}_{22}^0(\varepsilon) V_{21} \mathbf{G}_{11}^0(\varepsilon) +$$

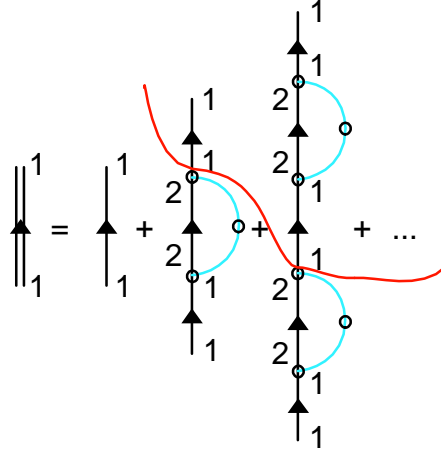


Figura ~2-6: Diagramas de Feynman representando la expansión en serie de $\mathbf{G}_{11}(\varepsilon)$. Nótese como la parte superior de todos los diagramas (dentro de la línea roja) es la misma expansión de $\mathbf{G}_{11}(\varepsilon)$.

$$\mathbf{G}_{11}^0(\varepsilon)V_{12}\mathbf{G}_{22}^0(\varepsilon)V_{21}\mathbf{G}_{11}^0(\varepsilon) \times V_{12}\mathbf{G}_{22}^0(\varepsilon)V_{21}\mathbf{G}_{11}^0(\varepsilon) + \dots \quad (2.31)$$

Esta ecuación se puede ver de manera más clara mediante diagramas de Feynman, figura 2-6. Se puede observar que la parte superior de los diagramas es la misma definición de $G_{11}(\varepsilon)$, por lo que si escribimos Σ_{11} como la parte que se repite en cada término,

$$\mathbf{G}_{11} = \mathbf{G}_{11}^0 + \mathbf{G}_{11}^0 \Sigma_{11} \mathbf{G}_{11}^0 + \mathbf{G}_{11}^0 \Sigma_{11} \mathbf{G}_{11}^0 \Sigma_{11} \mathbf{G}_{11}^0 + \dots, \quad (2.32)$$

encontramos una ecuación como la que se muestra en la figura 2-7, la cual es equivalente a

$$\mathbf{G}_{11} = \mathbf{G}_{11}^0 + \mathbf{G}_{11}^0 \Sigma_{11} \mathbf{G}_{11} \quad (2.33)$$

que es un case particular de la ecuación de Dyson. Recordemos que esta ecuación es sólo otro forma de escribir la ecuación de Schrödinger, ya que sus soluciones son las mismas para las dos ecuaciones.

Apliquemos ahora la teoría de la función de Green a las cadenas lineales que vimos

puede armar la recurrencia

$$\Sigma_n^+ = V_{n,n+1} \frac{1}{\varepsilon - E_{n+1} - \Sigma_{n+1}^+} V_{n+1,n}, \quad (2.37)$$

Si suponemos un sistema homogéneo e infinito, $E_i = E_0 \ \forall i$, $V_{ij} = V \ \forall i, j$, y $N \rightarrow \infty$, resulta el teorema de Bloch $\Sigma_n^+ = \Sigma_{n+1}^+ = \Sigma$, con lo que,

$$-\Sigma^2 + \Sigma(\varepsilon - E_0) - V^2 = 0, \quad (2.38)$$

cuyas soluciones son

$$\Sigma_{\pm} = \frac{\varepsilon - E_0}{2} \mp \sqrt{\left(\frac{\varepsilon - E_0}{2}\right)^2 - V^2}. \quad (2.39)$$

Entonces tenemos que

$$\mathbf{G}_{11}(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - E_0 - \Sigma} \quad , \quad (2.40)$$

con $\Sigma = \Delta - i\Gamma$, donde

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{\varepsilon - E_0}{2} + \sqrt{\left(\frac{\varepsilon - E_0}{2}\right)^2 - V^2}; \Gamma = 0 & \text{si } \varepsilon < E_0 - 2V \\ \Delta &= \frac{\varepsilon - E_0}{2}; \quad \Gamma = \sqrt{V^2 - \left(\frac{\varepsilon - E_0}{2}\right)^2} & \text{si } E_0 - 2V < \varepsilon < E_0 + 2V \quad , \\ \Delta &= \frac{\varepsilon - E_0}{2} - \sqrt{\left(\frac{\varepsilon - E_0}{2}\right)^2 - V^2}; \Gamma = 0 & \text{si } \varepsilon > E_0 + 2V \end{aligned} \quad (2.41)$$

y vemos que aparece una energía imaginaria para las energías correspondientes a la banda de estados permitidos. ¿Qué tiene que ver esta energía imaginaria con la que encontramos en la regla de Oro de Fermi?. La aproximación corresponde a tomar $\Gamma(\varepsilon)$ como $\Gamma(\varepsilon = E_0)$, una constante para toda energía. Si pensamos que la cadena es como un "ambiente" para el sitio 1, y consideramos que Γ está relacionado con la densidad de estados de este ambiente, llegamos a la conclusión de que para que un sistema pueda ser aproximado por la ROF necesita tener un ambiente con una densidad de estados casi constante e infinita, lo que llamaremos *aproximación de banda ancha*). Tal vez se puede aprovechar todo lo que conocemos de las cadenas lineales, con densidades de estados como la de la figura

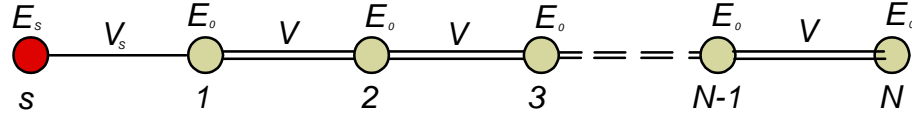


Figura 2-8: Cadena lineal con un sitio superficial acoplado débilmente ($V_s \ll V$).

2-5, para encontrar el sistema buscado.

2.4 El modelo

Supongamos que se toma una cadena lineal como el de (2.10), y unimos a esta cadena un estado superficial acoplado al primer sitio de la cadena mediante $V_s \ll V$. El efecto de esto sobre la función de Green del estado superficial es

$$\mathbf{G}_{ss}(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - E_s - \left(\frac{V_s}{V}\right)^2 \Sigma}, \quad (2.42)$$

con la misma Σ definida anteriormente. El prefactor multiplicando a Σ tiene el efecto de reducir tanto su valor, que la dependencia con la energía del mismo se puede despreciar y aproximar mediante una constante. Siendo este uno de los efectos que buscábamos, resulta interesante estudiar la dinámica de este sistema. Esquemáticamente, es como se muestra en la figura 2-8.

Para hacer cálculos numéricos, se modelaron cadenas de tamaño finito N , y se estudió la dinámica del sistema mediante una diagonalización directa del Hamiltoniano, utilizando los autovectores y sus respectivos autovalores. Con esto nos aseguramos, hasta la precisión numérica permitida por la computadora, estar realizando una evolución cuántica *exacta* del sistema considerado. Esto es importante porque una solución analítica exacta es casi imposible, pues requiere la inversión de una matriz de dimensión $N \times N$.

Se eligió como estado inicial al vector $|\psi(t=0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}$ en la base de sitio, significando esto la partícula inicialmente en el sitio superficial con probabilidad 1.

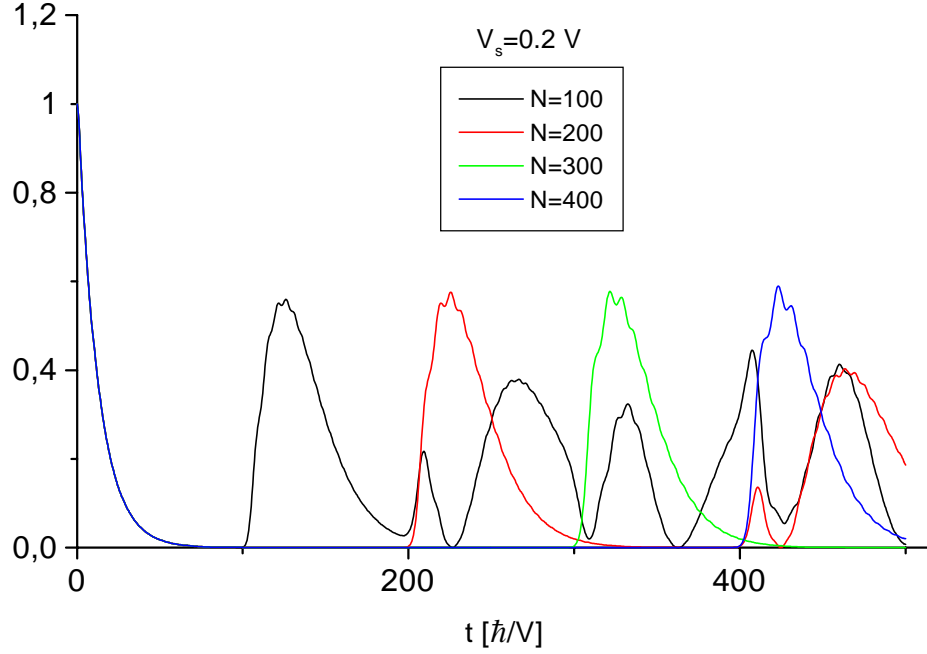


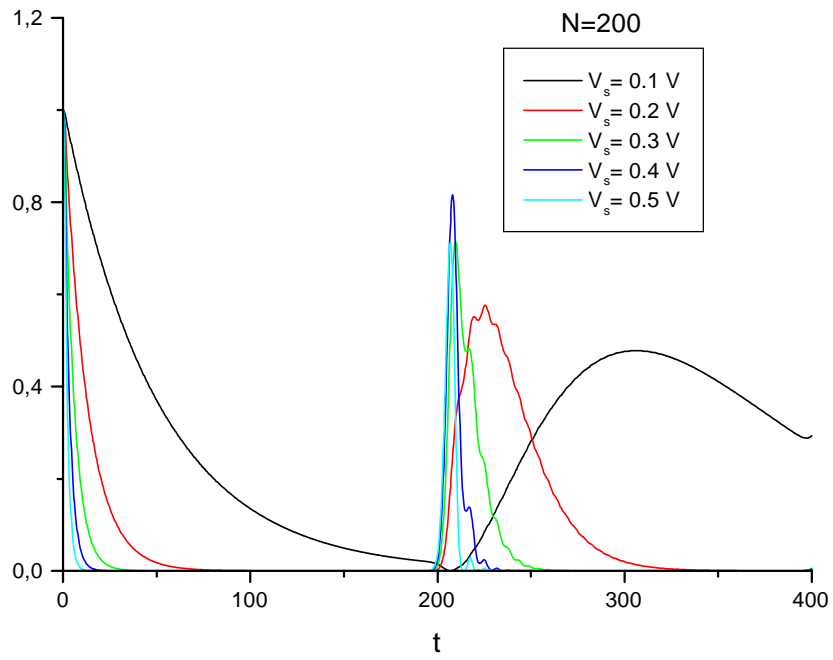
Figura 2-9: Función de autocorrelación para el sitio acoplado débilmente a la cadena, para diferentes largos de la cadena. Nótese que el tiempo de Heisenberg es proporcional a N

Se estudió la función de autocorrelación

$$P_{ss}(t) = |\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle|^2 = \left| \langle \psi(0) | e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} | \psi(0) \rangle \right|^2. \quad (2.43)$$

Los resultados obtenidos para la dinámica se muestran en las figuras 2-9 y 2-10.

En estas se remarcen dos visibles características. Primero, el decaimiento exponencial. Segundo, un eco de probabilidad en un tiempo que es proporcional a N . Como ya sabemos, este eco ocurre en el tiempo de Heisenberg, y tiene su origen en el tamaño finito del sistema y en la existencia de una frecuencia mínima en el “ambiente” del sitio s . Cuando suponemos que el espectro del baño es un continuo, este tiempo de



Figura~2-10: Función de autocorrelación para el sitio acoplado débilmente a la cadena, para diferentes acoples. Nótese como cambia la pendiente de la exponencial antes del tiempo de Heisenberg con V_s , aunque la posición del eco no varía.

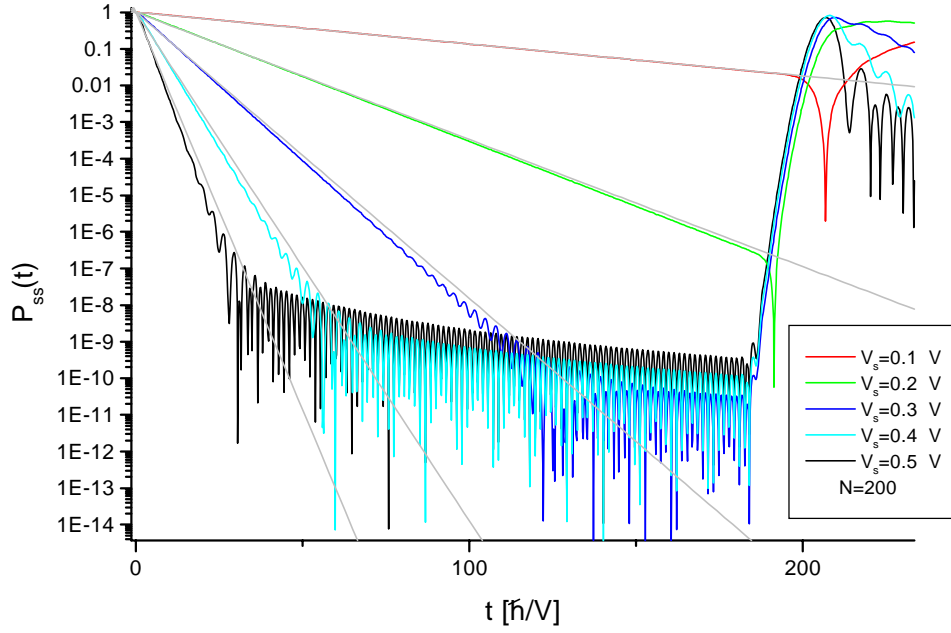


Figura 2-11: Gráfico logarítmico de la función de autocorrelación para diferentes acoples V_s del sitio superficial con la cadena. Las líneas en gris representan el decaimiento exponencial calculado con la Regla de Oro de Fermi para cada sistema.

Heisenberg tiende a infinito. Calculando la densidad de estados local mediante (2.41),

$$N_0(\varepsilon) = \frac{1}{\pi V^2} \sqrt{V^2 - \left(\frac{\varepsilon - E_0}{2} \right)^2}, \quad (2.44)$$

y poniendo $N_0(E_0)$ en la ecuación (2.6), encontramos cual sería el tiempo de decaimiento predicho por la Regla de Oro de Fermi si la cadena fuese infinita y su espectro continuo

$$\frac{1}{\tau_F} = \frac{2}{\hbar} \frac{|V_s|^2}{V}. \quad (2.45)$$

En la figura 2-11 se puede ver cómo ajusta este valor de τ_F predicho por la ROF con el cálculo exacto de la dinámica del sistema. Se ve que el ajuste mejora cuanto menor

es V_s a V , o sea que $\Gamma(\varepsilon)$ puede ser mejor aproximado por una constante. Notar que este ajuste es completamente novedoso. En [GAG97] se estudia la amplitud de oscilación de un oscilador armónico cuántico acoplado a un sistema de osciladores armónicos independientes. La forma de este acople es Lorentziano. El resultado que se obtiene es un decaimiento exponencial, pero este no fué comparado con la aproximación de la ROF. Es importante destacar que el sistema de osciladores estudiado en esta referencia es completamente correspondiente al de una cadena lineal como las aquí presentadas.

Anteriormente dijimos que aproximar el espectro del baño como infinito y continuo tenía consecuencias notables en la dinámica. Ya vimos que la aproximación de un ambiente con un espectro continuo hace desaparecer (o lleva al infinito) el tiempo de Heisenberg. Este es uno de los efectos del tamaño finito de sistemas. Si bien la aproximación es buena para sistemas macroscópicos (siendo τ_F proporcional al tamaño del sistema, $N \sim 10^{23}$ partículas es suficiente), en sistemas relativamente pequeños es posible observar experimentalmente ecos de probabilidad, los llamados *mesoscópicos*[PLU95].

Aproximar el espectro como infinito tiene efectos que son mucho más difíciles de observar experimentalmente. Estos tienen que ver con las frecuencias más altas que puedan existir en el sistema, o sea con los tiempos más cortos. Sabemos que a tiempos muy cortos, cualquier evolución cuántica irá como el cuadrado de un coseno, y comenzará a hacerse distinto cuando las componentes con frecuencias más chicas se hagan más importantes. Cuando el espectro demasiado amplio la frecuencia más grande tiende a infinito, con lo que es muy difícil detectar dinámica a cortos tiempos similar a un coseno al cuadrado. Sin embargo, en el sistema aquí estudiado, si es posible acceder a estos tiempos cortos. Los resultados son los que se observan en la figura 2-12. Como se puede ver, la evolución comienza desde probabilidad 1 a tiempo cero y evoluciona exactamente como $\cos^2(\frac{V_s t}{\hbar}) \sim 1 - (\frac{V_s t}{\hbar})^2$ para tiempos chicos, menores a \hbar/V .

Este tiempo, llamado *tiempo de Debye*, fué ya predicho en [HPZ92], y es básicamente \hbar dividido por el ancho de banda (que es la frecuencia más alta involucrada en el sistema, en el caso de un baño fonónico esta es la frecuencia de Debye). Observando la suavidad

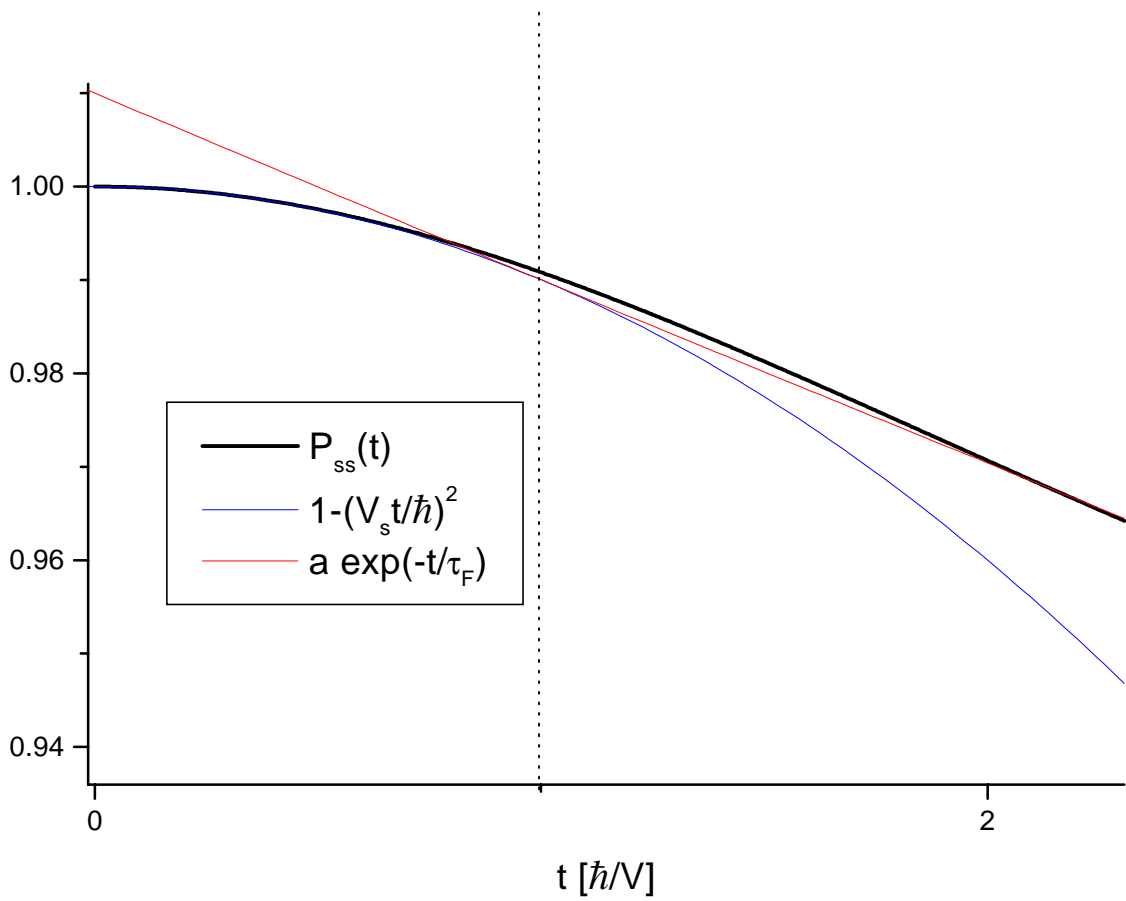


Figura 2-12: Función de autocorrelación para el sitio superficial (negro). En azul se ve el comportamiento típico para tiempos pequeños, y en rojo la aproximación de la ROF para tiempos grandes. La línea de puntos vertical indica el tiempo de Debye.

en el gráfico, tanto de la función de autocorrelación como de su derivada, decidimos hacer un ajuste de las funciones que corresponden a los diferentes intervalos en el gráfico. Para tiempos menores al tiempo de Debye tenemos

$$P_{ss} \simeq 1 - \left(\frac{V_s t}{\hbar} \right)^2, \quad (2.46)$$

mientras que para tiempos mayores

$$P_{ss} \simeq a e^{-\frac{t}{\tau_F}}. \quad (2.47)$$

Exigiendo los requisitos físicos de continuidad en la probabilidad y en la corriente se traduce en la existencia de un tiempo t_c en el que se igualan las funciones y sus derivadas,

$$1 - \left(\frac{V_s t_c}{\hbar} \right)^2 = a e^{-\frac{t_c}{\tau_F}}, \quad (2.48)$$

$$-2 \left(\frac{V_s}{\hbar} \right)^2 t_c = -\frac{a}{\tau_F} e^{-\frac{t_c}{\tau_F}}. \quad (2.49)$$

Dividiendo una ecuación por la otra,

$$1 - \left(\frac{V_s t_c}{\hbar} \right)^2 = 2\tau_F t_c \left(\frac{V_s}{\hbar} \right)^2, \quad (2.50)$$

multiplicando por $\tau_q^2 = \left(\frac{\hbar}{V_s} \right)^2$ a ambos lados,

$$t_c^2 + 2\tau_F t_c - \tau_q^2 = 0. \quad (2.51)$$

Luego, la solución física corresponde a tiempos positivos

$$t_c = -\tau_F + \sqrt{\tau_F^2 + \tau_q^2}, \quad (2.52)$$

dado que τ_q es el tiempo mínimo en que ocurre una transición en un sistema cuántico,

tiene que cumplirse $\tau_F \gg \tau_q$, por lo tanto

$$t_c \simeq \tau_F \left(1 + \frac{\tau_q^2}{2\tau_F^2} \right) - \tau_F = \frac{1}{2} \frac{\tau_q^2}{\tau_F}. \quad (2.53)$$

Reemplazando con 2.45 y τ_q , tenemos finalmente

$$t_c = \frac{\hbar}{V} = \tau_D \quad (2.54)$$

que es el mencionado tiempo de Debye. Notese que en la figura 2-12 el tiempo en que la función de autocorrelación se separa de la función coseno cuadrado es aproximadamente el predicho por la teoría.

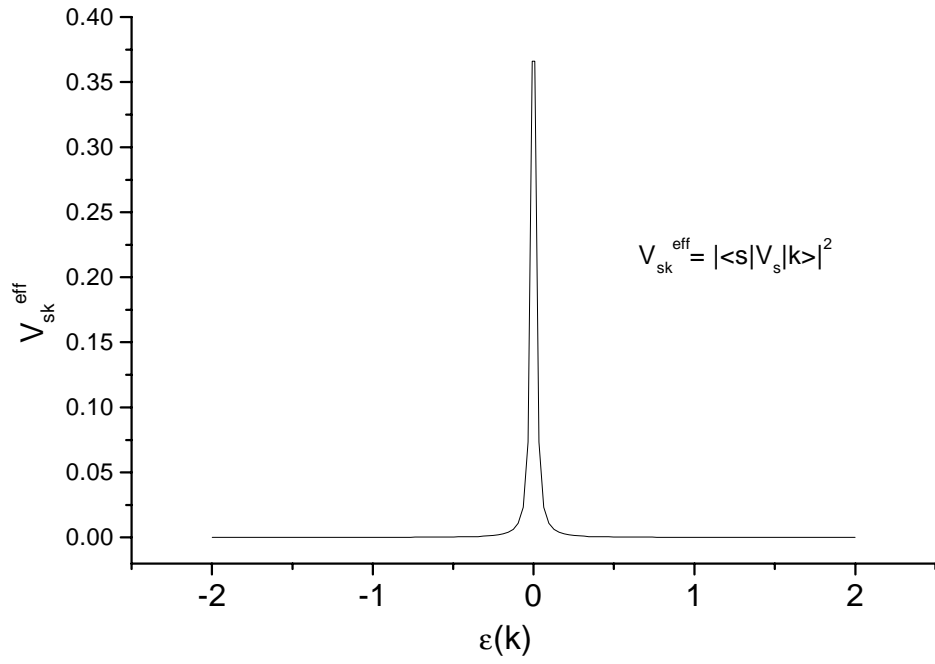
En la figura 2-13 se puede ver, como un dato extra a los ya presentados, un gráfico del acople efectivo que ve el estado $|s\rangle$ con cada uno de los estados de la cadena, en función de la energía.

$$V_{sk}^{eff} = |\langle s | V_s | k \rangle|^2 \quad (2.55)$$

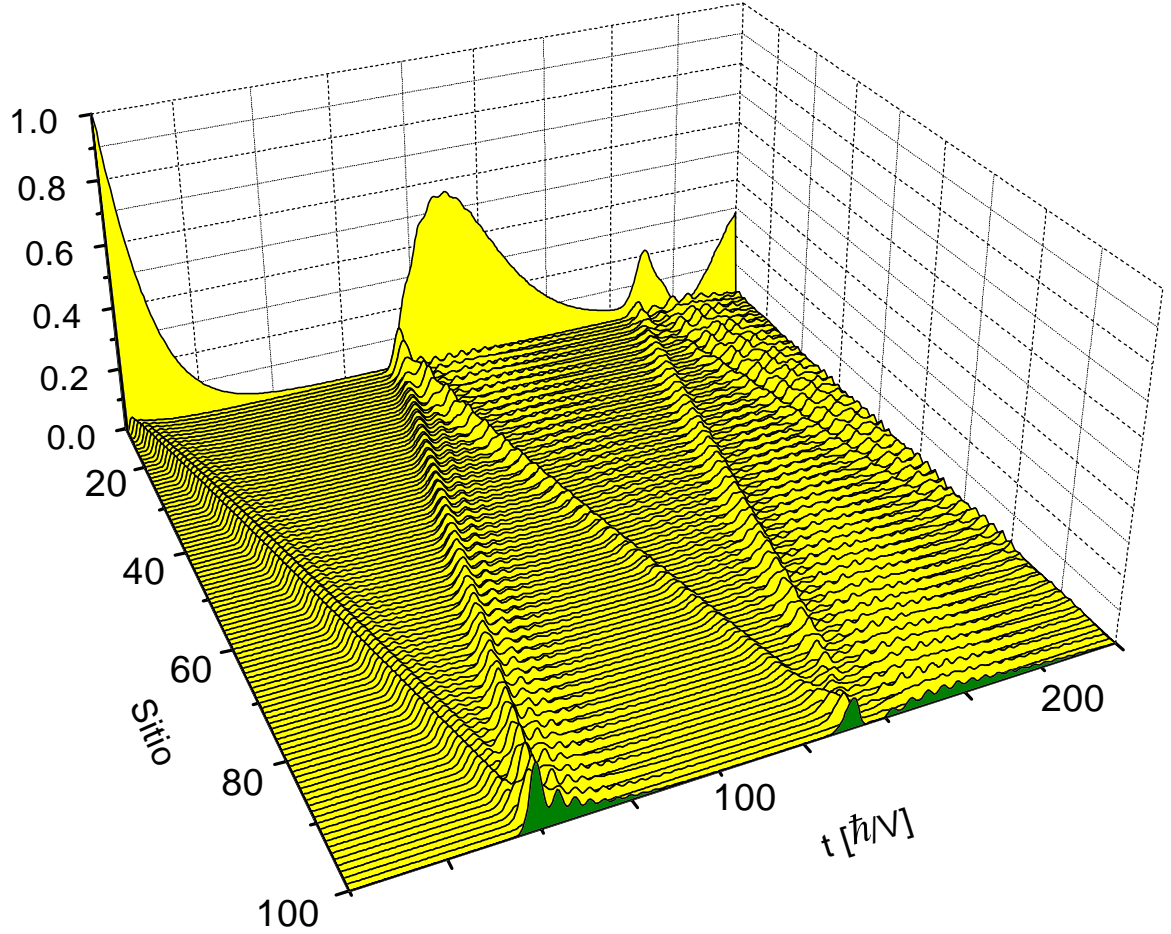
La forma de este acople ajusta con una Lorentziana. También podemos graficar la probabilidad en función del tiempo y del espacio, viendo con esto como se genera un *paquete de ondas* que se desplaza por la cadena con una velocidad de grupo bien definida (figura 2-14). Es interesante ver como es el efecto del eco en el tiempo de Heisenberg, y cómo luego de algunas reflexiones se comienzan a generar patrones de interferencia espacio-temporales.

2.5 Resultados

Hemos entonces encontrado un sistema suficientemente simple como para que conozcamos bien sus propiedades. A pesar de su descripción completamente cuántica, contiene comportamientos típicamente asociados a sistemas macroscópicos. Recalcamos, la solución exacta del sistema (aunque sea finito y pequeño) se ajusta de muy buen grado con la Regla de Oro de Fermi; y este ajuste mejora aún con el incremento en el tamaño del



Figura~2-13: Acople efectivo entre el estado superficial y los estados $|k\rangle$ de la cadena. Este acople es de forma Lorentziana.



Figura~2-14: Función $P_{sj}(t)$ (probabilidad de encontrar la partícula en el sitio j si a tiempo cero estaba ubicada en el sitio s , $\left| \langle j, t | e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} | s, t = 0 \rangle \right|^2$). Nótese la clara forma del paquete de ondas que avanza por la cadena con una velocidad de grupo bien definida, se refleja en el extremo de la cadena y vuelve a la otra punta. Es remarcable el hecho de que el paquete de ondas avanza mientras todavía hay bastante probabilidad de encontrar la partícula en el sitio s . También es notable la manera en que se gesta el eco mesoscópico. Después de este es posible distinguir franjas de interferencia espacio temporales en la cadena.

sistema, con lo que esta aproximación semiclásica resulta una excelente aproximación, inclusive en este límite para el cual no está diseñada.

Sin embargo, la ROF falla (por sus suposiciones) a tiempos demasiado cortos y demasiado largos, donde ninguna aproximación semiclásica puede describir la dinámica cuántica preponderante. Ambos regímenes son difíciles de obtener experimentalmente. Por un lado es difícil mantener un sistema cuántico aislado por largo tiempo. Por otra parte hay dificultades tecnológicas para acceder a los tiempos cortos. Sólo recientemente y en algunos sistemas seleccionados ha sido posible acceder experimentalmente a estos tiempos [WBF⁺97]. La práctica usual ante un decaimiento exponencial es extrapolar los puntos experimentales hasta el tiempo cero para normalizar la curva (polarización inicial, densidad, etc.). Sin embargo, lo que muestran los gráficos obtenidos aquí es que la magnitud inicial del observable no es extrapolable de la exponencial obtenida experimentalmente. La cantidad por la que estaríamos “sobreestimando” se puede calcular fácilmente de (2.48),

$$a = \left(1 - \left(\frac{V_s}{V}\right)^2\right) \exp \left[2 \left(\frac{V_s}{V}\right)^2\right] \simeq 1 + \left(\frac{V_s}{V}\right)^2. \quad (2.56)$$

Conociendo entonces la relación $(V_s/V)^2$, es posible estimar el error experimental. Esta relación se puede obtener de la medición del tiempo de Fermi y de la densidad de estados.

Resulta interesante estudiar el efecto de que el estado superficial tenga una energía fuera del centro de la banda. Al no contar con la simetría de ese punto, algunos de los efectos aquí estudiados puede cambiar drásticamente. Si ponemos al estado cerca del borde del espectro, puede suceder que el sitio superficial ya no “vea” una banda ancha y homogénea, sino que por efecto de la finitud del espectro y por la divergencia del borde de la banda cambie el tiempo de Debye. Se estudió el comportamiento de la función de autocorrelación para algunas energías cercanas al borde de la banda. El primer efecto que se advirtió es que τ_F cambió. Esto se debe a que la densidad de estados local depende

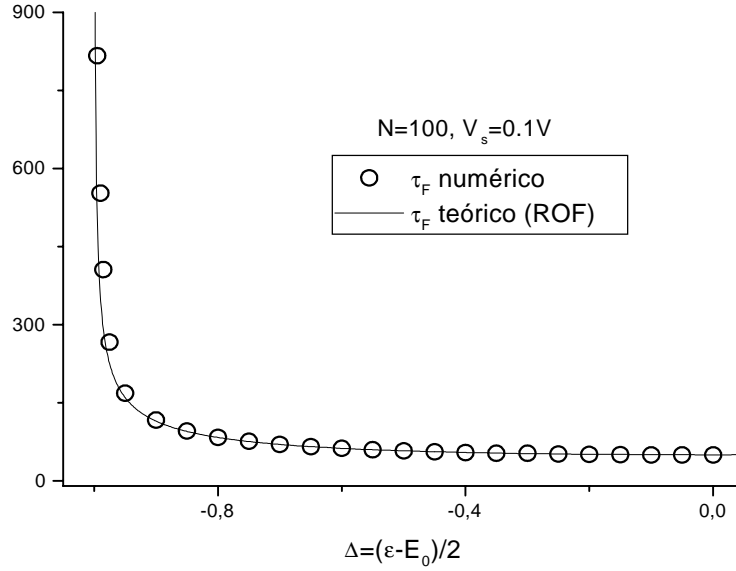
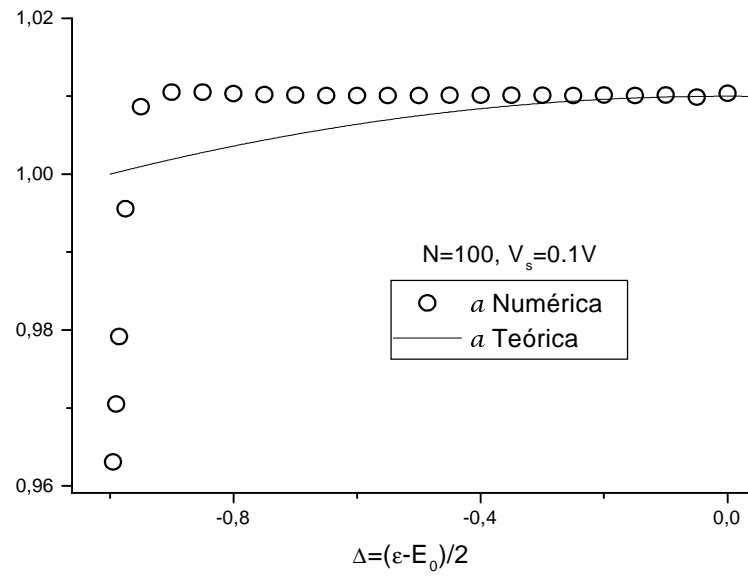


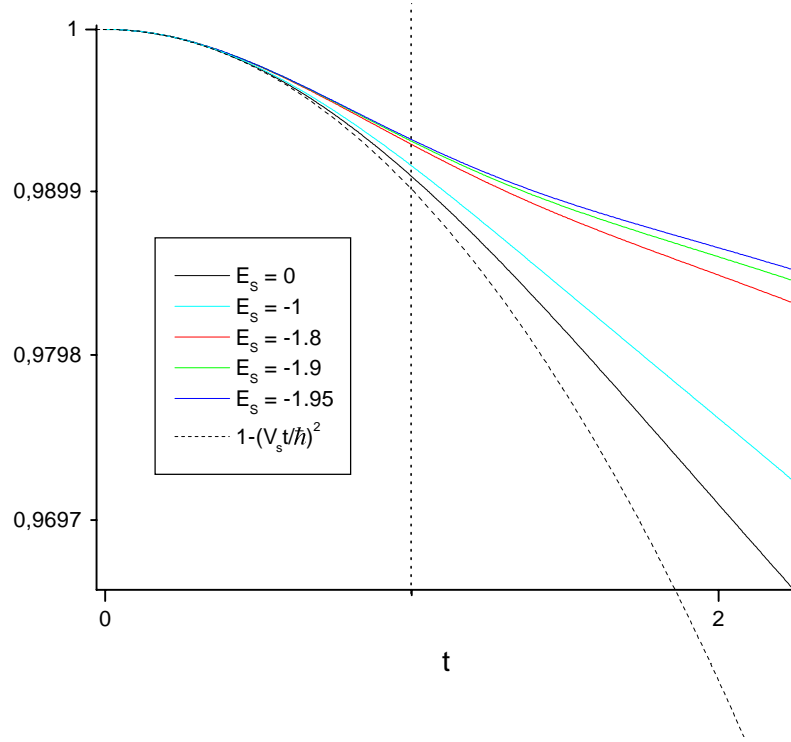
Figura 2-15: Comparación de los tiempos de Fermi obtenidos numéricamente con los predichos por la ecuación 2.45 para energías del sitio superficial fuera del centro de la banda.

de la energía. Calculando esta densidad mediante (2.41), se logró ajustar exitosamente el tiempo de Fermi predicho por (2.45) con la evolución obtenida. Se puede ver un gráfico de los tiempos de Fermi predichos por (2.45) con los obtenidos numéricamente en la figura 2-15.

Los resultados para la dinámica se ven en la figura 2-17. Se observa en este gráfico que al tiempo de Debye \hbar/V la función de autocorrelación ya es distinguible de la aproximación a tiempos cortos $\cos^2(V_s t/\hbar)$; aunque tampoco es aproximable por el decaimiento exponencial posterior. No sólo cambia el valor del tiempo de Fermi, sino el valor a de la probabilidad inicial (2.48). Esto es de esperar, porque a se dedujo para el centro de la banda. Si incluimos la dependencia en energía de τ_F y t_c encontramos la



Figura~2-16: Comparación de los valores para la probabilidad inicial a en función de la energía superficial, obtenidos de igualar la función y la derivada de los comportamientos asintóticos de la función de autocorrelación con los valores obtenidos numéricamente.



Figura~2-17: Dinámica para sistemas con la energía superficial fuera del centro de la banda. Nótese el cambio en en el tiempo en que se separa la dinámica de la evolución cuadrática.

dependencia de a en la energía

$$a(\varepsilon) = \frac{V^2}{V_s^2 \left(\left(\frac{\varepsilon - E_0}{2} \right)^2 - V^2 \right)} \left(V^2 - \sqrt{V^4 + 4V_s^2 V^2 - 4V_s^2 \left(\frac{\varepsilon - E_0}{2} \right)^2} \right) \times \exp \left(1 - \frac{1}{V} \sqrt{V^4 + 4V_s^2 V^2 - 4V_s^2 \left(\frac{\varepsilon - E_0}{2} \right)^2} \right). \quad (2.57)$$

Se puede ver la comparación entre los valores de a obtenidos numéricamente con los de (2.57) en la figura 2-16. Se puede observar claramente que, excepto para el centro de la banda, los valores son distinguibles. Es remarcable el comportamiento observado en esta constante a , Primero, para un gran rango de energías permanece constante, y

segundo cerca del borde de la banda se hace menor a 1. Esto último indica la imposibilidad de obtener en el ajuste de función y pendiente entre una función cuadrática y una exponencial. Un comportamiento anómalo es previsible cerca del borde de la banda, ya que allí la densidad de estados es casi cero y el estado superficial junto con su vecino se transforman en un sistema de dos estados muy separados en energía, con poca interacción con el resto. En el límite de la energía superficial muy distinta de E_0 la dinámica es la de (2.9) disminuído en amplitud[LPD90].

Como algunos antecedentes en la búsqueda de sistemas que muestren decaimiento exponencial, se encuentran los resultados de E.T. García et. al [GAG97] y Y. Zhang et. al. [HPZ92]. En el primero se estudia la dinámica de un sistema compuesto por un oscilador armónico acoplado débilmente a un baño, que se modela como un conjunto finito de osciladores armónicos independientes. Las energías de los osciladores son equiespaciadas y el acople del sistema con el baño tiene una forma Lorentziana. El resultado que obtienen estudiando la amplitud del oscilador es un decaimiento exponencial que atribuyen a la *irreversibilidad* provocada por el contacto con el baño. En la segunda referencia, se estudia la pérdida de coherencia de un sistema compuesto, nuevamente, por un oscilador armónico acoplado a un baño de infinitos osciladores armónicos. El parámetro de estudio permite variar la forma de acople del oscilador con el baño, y se encuentra que para un acople de forma Lorentziana la pérdida de coherencia es exponencial. Los factores clave a resaltar de ambas referencias son la forma del espectro y la del acople del sistema con el ambiente.

Quisiera hacer notar que muchos de los resultados obtenidos en este capítulo dependen de la "homogeneidad" en el espectro de los sistemas. Es decir que para que existan los ecos mesoscópicos y el decaimiento exponencial sea tan puro, es necesario que se conserven las fases de las funciones de onda, que provocan las interferencias que hacen a la dinámica. Cuando las energías se ven perturbadas, aparecen nuevos efectos cuánticos adicionales tales como la localización y el camino libre medio de una función de onda. Estos efectos son producto de interferencias y pérdida de coherencia, y permiten

la aparición de comportamientos muy distintos de los hasta aquí estudiados.