Comenzamos esta última hoja con unos rudimentos de mecánica cuántica en una dimensión espacial para que sea más fácil. Refleja lo que quieras en tu trabajo o sustitúyelo por referencias ([3], [4], [2], [5]). La física cuántica surgió de observar que a escalas subatómicas las partículas comparten propiedades con las ondas. Por ejemplo, no están localizadas en un punto y sufren difracción. El modelo matemático consiste en asociarles una *función de ondas* $\Psi = \Psi(x, t)$ con $x, t \in \mathbb{R}$ indicando posición y tiempo. Esta función no es medible físicamente y además toma valores complejos. Su interés radica en que participa en la interpretación probabilista cuántica de la que seguro que has oído hablar. Concretamente, su significado es que para cada tiempo t fijo $|\Psi(x,t)|^2$ es la función de densidad de la probabilidad de detectar la partícula en la posición x. En particular, $\int |\Psi|^2\, dx = 1$ para todo tiempo.

Por ejemplo, si $|\Psi|^2 = a^{-1}\pi^{-1/2}e^{-x^2/a^2}$ con $a > 0$, entonces la probabilidad de detectar la partícula en $[-a, a]$ es $\int_{-a}^{a} |\Psi|^2 = 0{,}8427\dots$ y la de detectarla en $x > 10a$ es infinitesimal. Si a es muy pequeño (que es lo que ocurre en la práctica) nos parecerá que la partícula está concentrada en el origen. En física cuántica las escalas espaciales están relacionadas con la *constante de Planck* (reducida) $\hbar$, aproximadamente $1{,}05 \cdot 10^{-34} J \cdot s$, dividida por el momento lineal, que típicamente es mucho mayor.

Para que practiques, te propongo un ejemplo relacionado con los átomos. Dejo a tu decisión incluirlo o no en el TFG. Si tienes espacio, a mí sí me parece conveniente.

1) Se sabe que la función de ondas del electrón del átomo de hidrógeno (no excitado) en términos de la distancia r al núcleo es[1] $\Psi(r, t) = 2r_0^{-3/2} r\, e^{-r/r_0 - iE_1 t/\hbar}$ donde r_0 es el *radio de Bohr* $r_0 = \frac{\hbar}{m_e c\alpha} \approx 5{,}29 \cdot 10^{-11}\, m$ y $E_1 = \frac{1}{2} m_e c^2 \alpha^2 \approx 2{,}18 \cdot 10^{-18} J$. Comprueba que $\int_0^\infty |\Psi|^2\, dr = 1$ y muestra que hay una probabilidad mayor que el 93 % de detectar el electrón a distancia menor que $3r_0$. Indicación: Las fórmulas para r_0 y E_1 son irrelevantes.

La función de ondas de una partícula de masa m no sometida a fuerzas está regulada por la *ecuación de Schrödinger*

$$i\partial_t \Psi = -\frac{\hbar}{2m} \partial_{xx} \Psi.$$

Un ejemplo básico de mecánica cuántica es el *pozo de potencial infinito* que corresponde a encerrar una partícula en un intervalo $I = [0, a]$ con fronteras infranqueables, de forma que Ψ solo está definida en I y $\Psi(0, t) = \Psi(a, t) = 0$. Consideramos el problema introducido en [1] en que se parte de una partícula en $[0, 1]$ en su *estado fundamental*[2] y se mueve súbitamente la frontera de la derecha de $x = 1$ a $x = \Lambda > 1$. Combinando la ecuación de Schrödinger con las condiciones de frontera asociadas al modelo, la función de ondas viene determinada por

$$(1) \quad \begin{cases} i\partial_t \Psi = -\frac{\hbar}{2m} \partial_{xx} \Psi & \text{si } 0 < x < \Lambda, \\ \Psi(0,t) = \Psi(\Lambda, t) = 0, & \Psi(x, 0) = f(x) \end{cases} \quad \text{con} \quad f(x) = \begin{cases} \sqrt{2}\,\mathrm{sen}(\pi x) & \text{si } 0 \le x \le 1, \\ 0 & \text{si } 1 \le x \le \Lambda. \end{cases}$$

[1]Por si te interesa, m_e es la masa del electrón, c la velocidad de la luz y α la constante de estructura fina.

[2]Esto significa en este contexto $\Psi(x, t) = \sqrt{2}\,\mathrm{sen}(\pi x) e^{-i\pi^2 \hbar t/(2m)}$.

Sea g la extensión 2Λ-periódica de la función que vale $\sqrt{2}\,\mathrm{sen}(\pi x)$ en $[-1,1]$ y se anula en $[-\Lambda,\Lambda]-[-1,1]$. En particular, g es impar y $f(x)=g(x)$ en $[0,\Lambda]$. Su desarrollo de Fourier es de la forma

$$g(x)=\sum_{n\in\mathbb{Z}} a_n e\Big(\frac{nx}{2\Lambda}\Big) \qquad \text{con} \quad a_n=-a_{-n}.$$

Los a_n tienen una fórmula medianamente sencilla [1, (2.3)], pero no te preocupes por ella porque es irrelevante para lo que vamos a hacer. Sí deberías entender por qué hay un desarrollo de Fourier como el anterior.

2) Demuestra que

$$\Psi(x,t)=\sum_{n\in\mathbb{Z}} a_n e\Big(\frac{nx}{2\Lambda}-\frac{n^2t}{T}\Big) \qquad \text{con} \quad T=\frac{4m\Lambda^2}{\pi\hbar} \tag{2}$$

resuelve (1) formalmente (sin entrar en posibles problemas de convergencia) y explica matemáticamente por qué cumple la condición $\int_0^\Lambda |\Psi|^2\,dx=1$. Indicación: Lee el siguiente comentario y emplea $2\int_0^\Lambda |\Psi|^2\,dx=\int_{-\Lambda}^\Lambda |\Psi|^2\,dx$.

A pesar de que (1) solo involucra la definición de Ψ para $x\in[0,\Lambda]$, la fórmula (2) permite extenderla a $x\in\mathbb{R}$ como una función 2Λ-periódica impar.

3) Con lo que has aprendido del efecto Talbot, explica la fórmula

$$\Psi(x,aT/q)=\frac{1}{q}\sum_{m=0}^{q-1} G(-a,m,q)\,g\Big(x-\frac{2\Lambda m}{q}\Big)$$

donde a/q es una fracción irreducible. No hace falta que hagas ninguna cuenta, solo que expliques que esto es como el ejercicio 6 de la hoja 3 con un cambio de variable.

Es decir, tenemos fórmulas explícitas fáciles para Ψ en tiempos "fraccionarios". Como f se anula en $[1,\Lambda]$, es natural que para Λ es grande en comparación con q haya *zonas prohibidas*, esto es, subintervalos de $[0,\Lambda]$ en los que $\Psi=0$ y por tanto con probabilidad nula de detectar la partícula allí.

4) Para q impar, $1<q<\Lambda$, prueba que existen zonas prohibidas en $[0,\Lambda]$.

Si $\Lambda>q$ en general no hay zonas prohibidas, lo curioso es que a veces surgen intervalos donde la probabilidad es uniforme para tiempos fraccionarios, esto es, $|\Psi|^2$ se vuelve constante no nula. Esas son en gran medida las "sorpresas" a las que se refiere el título de [1].

5) Para $\Lambda=5/2$, muestra que $|\Psi(x,T/3)|^2$ es constante en el intervalo $[2/3,1]$. Indicación: Si piensas en el dibujo de g verás que esto se traduce en comprobar que $\big|G(-1,0,3)\,\mathrm{sen}(\pi x)+G(-1,1,3)\sin(\pi x-5\pi/3)\big|^2$ es una función constante.

Para estudiar esta situación, veamos una expresión para la densidad de probabilidad.

6) Sea q impar y $\Lambda < q$, recordando que $G(a,b,q)e(\overline{4a}b^2/q)$ no depende de b y definiendo $\beta = \frac{q}{2\Lambda}$, prueba

$$\big|\Psi(x, aT/q)\big|^2 = \frac{2}{q}\Big|\sum_{k\in I(x)} e\Big(\frac{\overline{4a}k^2}{q}\Big)\operatorname{sen}(\pi x - \pi\beta^{-1}k)\Big|^2 \qquad \text{con} \quad I(x) = \Big[(x-1)\beta, (x+1)\beta\Big] \cap \mathbb{Z}$$

donde $\overline{4a}$ indica el inverso de $4a$ módulo q y k es una variable entera. Indicación: Nota que $g(x - 2\Lambda m/q) \neq 0$ si $-1 < x - \beta^{-1}m < 1$.

Curiosamente esas zonas en que la probabilidad es uniforme tienen un comportamiento aritmético. Consideramos la función $\mathfrak{d} : \mathbb{R} \longrightarrow [0,1)$ que asigna a cada x la distancia de $x + 1/2$ al entero más cercano. Por ejemplo, $\mathfrak{d}(7/2) = 0$, $\mathfrak{d}(n) = 1/2$ si $n \in \mathbb{Z}$ y $\mathfrak{d}(10/7) = 1/14$.

Vamos a probar el siguiente resultado:

Teorema. *Si $q, 2\Lambda \in \mathbb{Z}_{>1}$ son impares con $\Lambda < q$ y $c \in [0,\Lambda]$ cumple $q^{-1}\beta c - a\beta^{-1} - 1/2 \in \mathbb{Z}$, entonces $|\Psi(x, aT/q)|^2$ es constante en el intervalo $|x - c| \le \beta^{-1}\mathfrak{d}(\beta)$.*

7) Comprueba que al aplicar el teorema con $\Lambda = 5/2$ y $q = 3$, necesariamente $c = 5/6$ y se concluye que $|\Psi(x, T/3)|^2$ es constante en $[2/3, 1]$, como ya habíamos visto.

8) Demuestra que para todos los $|x - c| < \beta^{-1}\mathfrak{d}(\beta)$ se cumple $I(x) = I(c)$ y que $I(c)$ es invariante por la transformación $k \mapsto 2\beta c - k$. Indicación: Para la primera parte hay que ver que $I_1 = \big((c+1)\beta, (c+1)\beta + \mathfrak{d}(\beta)\big)$ y $I_2 = \big((c-1)\beta - \mathfrak{d}(\beta), (c-1)\beta\big)$ son intervalos que no contienen enteros. Hazlo solo para I_1 y di que para I_2 es similar. Si $n \in I_1 \cap \mathbb{Z}$ entonces $0 < (n - c\beta) - \beta < \mathfrak{d}(\beta)$. Comprueba que $n - c\beta$ es semientero ($\in \frac{1}{2} + \mathbb{Z}$) y explica por qué eso da una contradicción.

Para probar el teorema lo vamos a reducir a un problema aritmético. Si algo no te parece sencillo, explícalo más en tu trabajo de lo que lo hago yo aquí.

Usando la fórmula de Euler $2i \operatorname{sen} t = e^{it} - e^{-it}$ y lo que acabas de ver, se tiene que la suma interior en $|\Psi(x, aT/q)|^2$ se puede escribir para x en el intervalo del teorema como

$$2iS\, e^{i\pi x} + 2iT\, e^{-i\pi x} \quad \text{con} \quad S = \sum_{k\in I(c)} e\Big(\frac{\overline{4a}k^2}{q} - \frac{k}{2\beta}\Big).$$

Si probamos $S = 0$ entonces claramente $|\Psi(x, aT/q)|^2$ es constante. De este modo, la existencia de mesetas de probabilidad está relacionada con la anulación de ciertas sumas parciales de Gauss. Por la simetría mencionada en el último ejercicio, esto se deduce si probamos que para todo k

$$e\Big(\frac{\overline{4a}k^2}{q} - \frac{k}{2\beta}\Big) + e\Big(\frac{\overline{4a}(2\beta c - k)^2}{q} - \frac{2\beta c - k}{2\beta}\Big) = 0,$$

lo cual solo puede ocurrir si los argumentos de ambas exponenciales difieren en un semientero porque $e(u)+e(v)=0$ se puede escribir como $e(u)=e(v-1/2)$.

9) Comprueba que $2\beta c$ difiere de $4a\Lambda+q$ en un múltiplo par de q y deduce de ello que la igualdad anterior se cumple si y solo si

$$2\frac{\overline{4a}k^2}{q}-\frac{k}{\beta}-2\frac{\overline{4a}(4a\Lambda-k)^2}{q}+\frac{4a\Lambda+q-k}{\beta}$$

es un entero impar.

10) Usando $\overline{4a}4a=1+nq$ y la definición de β, comprueba que este es el caso y concluye la prueba del teorema.

Tarea a entregar. Como siempre, debes que escribir un documento que combine las soluciones de los ejercicios anteriores. La verdad es que en esta última hoja tengo dudas acerca de la extensión y la dificultad. No te sugiero ninguna extensión y si ves que te resulta difícil, dímelo y te doy más indicaciones. El resultado conformará un quinto y último capítulo de tu TFG llamado *El pozo de potencial expandido* o la variante que elijas.

Referencias

[1] C. Aslangul. Surprises in the suddenly-expanded infinite well. *J. Phys. A*, 41(7):075301, 23, 2008.

[2] F. Chamizo. Un poco de física cuántica para chicos listos de primero (del grado de física o matemáticas). `https://matematicas.uam.es/~fernando.chamizo/physics/files/qf.pdf`, 2015.

[3] L. D. Faddeev and O. A. Yakubovskiĭ. *Lectures on quantum mechanics for mathematics students*, volume 47 of *Student Mathematical Library*. American Mathematical Society, Providence, RI, 2009.

[4] A. Galindo and P. Pascual. *Mecánica cuántica*. Alhambra, Madrid, 1978.

[5] K. Konishi and G. Paffuti. *Quantum Mechanics: A New Introduction*. Oxford Philosophical Monographs. The Clarendon Press, Oxford University Press, Oxford, 2009.