Comienzo con una explicación de física básica por si te es de utilidad para motivar lo que viene después. Imagina que eres capaz de lanzar una piedra a 15 m/s y que quieres que supere un muro de 20 m ¿lo puedes hacer? Si normalizamos la energía potencial gravitatoria para que en el suelo valga cero, su fórmula es $V = mgh$ con h la altura y $g \approx 9{,}8 m/s^2$. Entonces la energía que imprimes a la piedra es $E = \frac{1}{2}m \cdot 15^2 + 0$ y la que necesitaría para superar el muro pasándolo rozando a velocidad v_0 es $\mathcal{E} = \frac{1}{2}mv_0^2 + mg \cdot 20$. Por pequeña que sea v_0 siempre $E < \mathcal{E}$ y por tanto es imposible. Repasando el argumento, se sigue que para superar muros de altura h necesitas ser capaz de lanzar piedras al menos a velocidad $\sqrt{2gh}$. Las piedras sin energía suficiente nunca pueden superar muros altos.

Curiosamente, en mecánica cuántica cualquier piedra puede superar cualquier muro de altura finita, eso sí, con probabilidad infinitesimal en el mundo macroscópico. En esta hoja vamos a ver diferentes soluciones de la ecuación de Schrödinger que muestran este fenómeno. Todo el rato vamos a trabajar con la ecuación independiente del tiempo (mira la hoja anterior) en una dimensión, es decir, con

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}\big(E - V(x)\big)\psi(x) = 0. \tag{1}$$

El ejemplo principal es lo que se llama *pozo de potencial finito*, que corresponde a tomar

$$V = V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in [-1/2, 1/2], \\ V_0 & \text{si } x \notin [-1/2, 1/2] \end{cases} \tag{2}$$

donde $V_0 > 0$. Como V es dicontinua en $x = \pm 1/2$, permitimos que ψ' tenga picos allí y así ψ'' reproduce un salto. Por ello, en toda esta hoja supondremos que ψ' es derivable a trozos y continua.

Desde el punto de vista clásico, una partícula de energía total $E < V_0$ en $[-1/2, 1/2]$ no puede salir de este intervalo (de este *pozo*), los muros se vuelven infranqueables porque para superarlos se necesita una energía $\frac{1}{2}mv_0^2 + V_0 \ge V_0 > E$.

Antes de resolver (1) con (2), vamos a resolver dos problemas relacionados algo más sencillos. En ellos, en cierto modo, alguna de las paredes o ambas se han movido al infinito y es imposible normalizar $\int |\psi|^2 = 1$. Más o menos es lo mismo que ocurre si uno considera la función de densidad correspondiente a elegir un número real al azar de $\mathbb{R}$. Todos tienen la misma probabilidad pero no se puede escoger $f(x) =$cte como función de densidad con $\int_{\mathbb{R}} f = 1$. Nos olvidamos entonces para estos problemas de la condición $\int |\psi|^2 = 1$ y pensamos solo en $|\psi|$ acotada. Fíjate que físicamente no es tan problemático porque la función de ondas de verdad Ψ es una integral de cosas del tipo $e^{-iEt/\hbar}\psi(x)$, los "tonos puros" [Cha15], y $\int |\psi|^2 = 1$ no impide tener $\int |\Psi|^2 = 1$. Por ejemplo, si revisas una hoja naterior, en el caso de la partícula libre las ψ correspondientes eran $e^{-i\hbar\xi^2 t/2m + 2\pi i \xi x}$ pero se obtenía una Ψ normalizable.

Los potenciales para estos problemas complementarios que vamos a estudiar son

$$V_1(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \le 0 \\ V_0 & \text{si } x > 0 \end{cases} \qquad \text{y} \qquad V_2(x) = \begin{cases} V_0 & \text{si } x \in [0,\epsilon] \\ 0 & \text{si } x \notin [0,\epsilon] \end{cases}$$

donde V_0 es, como antes, una constante positiva.

1) Supón que $0 < E < V_0$. Prueba que todas la soluciones acotadas de (1) con $V = V_1(x)$ son de la forma

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{iqx} + Be^{-iqx} & \text{si } x < 0 \\ be^{-\kappa x} & \text{si } x > 0 \end{cases}$$

con A, B y b constantes arbitrarias. Escribes fórmulas para $q > 0$ y κ en términos de E y V_0 (y, por supuesto, de $\hbar$ y m).

2) Explica por qué esto se puede interpretar como que la partícula penetra en la región $x > 0$ (que estaría prohibida en mecánica clásica porque $E < V_0$) típicamente hasta un x comparable a $\hbar/\sqrt{m(V_0 - E)}$.

3) Imponiendo que ψ y ψ' son continuas en $x = 0$, prueba que $|B/A|^2 = 1$.

En $Ae^{iqx} + Be^{-iqx}$ con $q > 0$, como habíamos visto en [Cha15], e^{iqx} corresponde a una partícula que se mueve hacia la derecha (momento positivo) y e^{-iqx} a una que se mueve a la izquierda (momento negativo). Los físicos interpretan $|B/A|^2$ como el porcentaje de partículas que rebotan en la pared, por ello llaman a esta cantidad *coeficiente de reflexión*. En el problema anterior, la interpretación que dan de que valga 1 es que las partículas que van a la derecha, aunque penetren un poco en la pared $x > 0$ que impone el potencial, acaban rebotando. Es natural pensar que si la pared es estrecha, muchas de ellas pasarán al otro lado. Esa es la idea en el problema que corresponde a V_2.

4) Supón que $0 < E < V_0$. Prueba que todas la soluciones acotadas de (1) con $V = V_2(x)$ son de la forma

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{iqx} + Be^{-iqx} & \text{si } x < 0 \\ ae^{\kappa x} + be^{-\kappa x} & \text{si } 0 < x < \epsilon \\ Ce^{iqx} + De^{-iqx} & \text{si } x > \epsilon \end{cases}$$

donde $q > 0$ y κ tienen las mismas fórmulas que antes.

En este caso el coeficiente de reflexión $|B/A|^2$ se define considerando $D = 0$ para que no haya partículas que lleguen a $x < 0$ desde el otro lado del muro. Si no entiendes bien esta motivación física, no te preocupes, tómalo como una definición.

5) Suponiendo como antes ψ y ψ' continuas, prueba que para $D = 0$ se cumple que todas las ψ no idénticamente nulas tienen $C \neq 0$. Indicación: Debes ver que $C = 0$ implica $A = B = a = b = 0$.

Probar que se cumple $|B/A|^2 < 1$ es trabajoso. Me conformo con hagas el siguiente cálculo que corresponde más o menos a datos de un electrón que salta algo comparable al tamaño de un átomo con energía la mitad de la de ionización.

6) Halla $|B/A|^2$ en el caso anterior cuando (con unidades del Sistema Internacional) $m = 9{,}1094 \cdot 10^{-31}$, $E = V_0/2 = 10^{-18}$ y $\epsilon = 10^{-10}$. Recuerda que $\hbar = 1{,}0546 \cdot 10^{-34}$. Indicación: Reduce todo a un sitema lineal que puedas resolver con Matlab/Octave o SAGE.

La propiedad cuántica de "atravesar paredes" sin tener energía suficiente desde el punto de vista clásico, es lo que se llama *efecto túnel*. Es posible medir distancias muy pequeñas cuantificando este efecto. Este es el principio del *microscopio de efecto túnel* desarrollado en los años 80 que permite "ver" átomos individuales. Por ello sus creadores recibieron el premio Nobel.

7) Lee en [Wik16] algo acerca de este microscopio y escribe unas cinco líneas indicando el principio de su funcionamiento.

Ahora vamos al objetivo planteado al principio, consistente en resolver (1) para el potencial (2). El resto de los ejercicios son relativos a este problema. Seguimos bajo las hipótesis de que ψ es acotada no idénticamente nula con ψ y ψ' continuas.

Veamos primero que si $E \geq V_0$, como en el caso clásico, las paredes se pueden superar y la partícula correspondiente puede estar en cualquier sitio por lo que la distribución de probabilidad es degenerada y no se puede normalizar.

8) Prueba que si $E \geq V_0$ y ψ es una solución, entonces $\int_{\mathbb{R}} |\psi|^2 = \infty$.

En lo sucesivo nos restringimos al caso $E < V_0$.

9) Prueba que las soluciones tienen decaimiento exponencial y por tanto $\int_{\mathbb{R}} |\psi|^2 < \infty$. Es decir, en este caso podríamos normalizar las soluciones, aunque no nos preocuparemos de ello.

10) Siempre se puede escribir $\psi = \psi_p + \psi_i$ con $\psi_p(x) = \big(\psi(x) + \psi(-x)\big)/2$ y $\psi_i(x) = \big(\psi(x) - \psi(-x)\big)/2$. Demuestra que si ψ es solución para cierta E, entonces ψ_p o bien es idénticamente nula o bien es solución para la misma E y que lo mismo ocurre con ψ_i. Concluye que basta estudiar las soluciones pares y las soluciones impares. Esto facilita el análisis.

11) ¿Existen soluciones con $E = 0$? Indicación: Para simplificar, estudia por separado las posibilidades ψ par y ψ impar.

12) Prueba que no hay soluciones con $E < 0$. Indicación: Procede como antes, separando el caso par y el impar.

El rango restante $0 < E < V_0$ solo lleva a un número finito de posibilidades para E, dados por ecuaciones que no admiten una solución explícita.

13) Demuestra que si $0 < E < V_0$, cuando ψ es par, los valores posibles de E son las soluciones de la ecuación

$$\sqrt{V_0 - E} = \sqrt{E}\tan\sqrt{\frac{mE}{2\hbar^2}} \tag{3}$$

y si ψ es impar

$$\sqrt{V_0 - E} = -\sqrt{E}\cot\sqrt{\frac{mE}{2\hbar^2}}. \tag{4}$$

Explica en ambos casos por qué sólo hay un número finito de soluciones (por supuesto, para V_0 y m fijados). Indicación: Para esto, escribe $E = x^2$ y piensa en las gráficas de ambos miembros de las ecuaciones.

Cuando $V_0 \to +\infty$ las paredes se vuelven infranqueables y deberíamos recuperar los niveles de energía del ejemplo principal de [Cha15].

14) Explica por qué cuando $V_0 \to +\infty$ las soluciones de (3) y (4) conforman un conjunto que tiene a ser $\{(n\pi\hbar)^2/2m \ : \ n \in \mathbb{Z}^+\}$. Indicación: Nota que $\tan x = \infty$ cuando $x = (k+1/2)\pi$ y $\cot x = \infty$ cuando $x = k\pi$ con $k \in \mathbb{Z}$.

Terminamos con lo que tienes que entregarme.

15) Comienza con una introducción que motive los ejemplos que se van a estudiar (si quieres puedes hacer variaciones sobre la de esta hoja). Después debes incluir las soluciones de todos los ejercicios (incluido el del microscopio) convenientemente hiladas. Esta vez no te doy más directrices que la recomendación de que separes bien los tres ejemplos. No hay limitación para el número de páginas. Sin enrollarte demasiado, utiliza lo que necesites.

Referencias

[Cha15] F. Chamizo. Un poco de física cuántica para chicos listos de primero (del grado de física o matemáticas). `http://www.uam.es/fernando.chamizo/physics/physics.html`, 2015.

[Wik16] Wikipedia. Scanning tunneling microscope — wikipedia, the free encyclopedia, 2016. [Online; accessed 21-September-2016].