

# Simetrías en la naturaleza y efecto túnel: breve estudio de pozos cuánticos dobles

S.R. Juárez Wysozka y G.G. Fernández Mendoza

*Departamento de Física, Escuela Superior de Física y Matemáticas, Instituto Politécnico Nacional,  
U.P. Adolfo López Mateos, Edificio 9, Ciudad de México, 07738, México.*

*e-mail: rebeca@esfm.ipn.mx*

Received 2 March 2016; accepted 22 April 2016

Es interesante entender el mecanismo por el cual se forman, en la naturaleza, materiales que presentan una asimetría en su aspecto y relacionar esto con un problema cuántico. Para ello analizamos detalladamente el comportamiento de una partícula cuántica en un doble pozo de potencial finito y otro parecido, el pozo doble tipo delta de Dirac, con el propósito de explicar cómo y cuándo se presenta el rompimiento de la simetría en estos casos. Por sencillez, consideramos ambos potenciales en una sola dimensión ( $x$ ) y enfocamos nuestra atención en la simetría  $V(x) = V(-x)$  de los potenciales. Encontramos, e ilustramos con detalle, los auto-estados (y sus energías) del operador Hamiltoniano  $\hat{H}$  y del operador de simetría de paridad  $\hat{\pi}$ . Determinamos la evolución temporal de los auto-estados de paridad y observamos un rompimiento de la simetría al combinarlos en una forma especial y planteamos las consecuencias de este rompimiento. Resaltamos la relevancia del efecto túnel que surge en el tratamiento cuántico de los problemas y relacionamos los resultados obtenidos con situaciones y materiales presentes en la naturaleza ( $\text{NH}_3$ ), su posible influencia en nuestro entorno y en particular, con la física involucrada en el funcionamiento del Maser.

*Descriptores:* Doble potencial cuántico; simetría; paridad; efecto túnel.

It is interesting to understand the mechanism by which some materials in nature, with an asymmetrical appearance, are formed and to relate it with a quantum problem. For this reason, we analyze with full details the behavior of a quantum particle in a finite double well potential and in a similar one, a double Dirac delta function well in order to explain, how and when, the symmetry breakup takes place in these cases. For simplicity we consider both potentials in one dimension ( $x$ ) and we focus our attention on the symmetry  $V(x) = V(-x)$  of the potentials. We find, and illustrate in detail, the eigenstates (and energies) of the Hamiltonian  $\hat{H}$  and of the parity symmetry  $\hat{\pi}$  operator. We determine the time evolution of the parity-eigenstates, we find that the parity symmetry is broken when they are combined in a special way and we set out the consequences of this breaking. We emphasize the relevance of the tunnel effect which arises in the quantum treatment of the problems and we relate the obtained results with naturally occurring situations and materials ( $\text{NH}_3$ ), its possible influence on our environment and particularly, with the physics involved in the operation of the Maser.

*Keywords:* Double quantum potential; symmetry; parity; tunnel effect.

PACS: 02.30.Em; 12.39.Pn; 34.20.G

## 1. Introducción

Desde tiempos muy antiguos el hombre ha observado la belleza en las simetrías que existen en la naturaleza, preguntándose si hay alguna forma de imitarlas o al menos entenderlas con precisión, pero ¿Qué es la simetría? En física la simetría de un objeto se puede describir en términos del efecto de una operación (la cual puede ser continua o discreta), si el objeto (o el medio en el que éste se encuentra) se mantiene sin cambios después de ser aplicada la operación, se dice que hay una simetría involucrada. Más estrictamente hablando, la simetría tiene que ver con el efecto de la aplicación de operadores sobre un sistema y dependiendo de la respuesta obtenida se determina si hay o no una simetría, al haber o no un cambio en el sistema.

En el presente trabajo consideramos la siguiente simetría

$$\hat{\pi}\hat{H}\psi(x) = \hat{H}\hat{\pi}\psi(x), \quad (1)$$

en donde  $\hat{\pi}$  es el operador de paridad,  $\hat{H}$  el Hamiltoniano del sistema y  $\psi(x)$  un estado cuántico.

*i.e.* el operador de paridad conmuta con el operador de Hamilton. Si las eigenfunciones del Hamiltoniano  $\hat{H}$  son no degeneradas, el operador de paridad comparte las mismas ei-

genfunciones de  $\hat{H}$ , por lo tanto, las soluciones para un problema con esta simetría deberán tener una paridad bien definida. Un problema que satisface dicha simetría es el pozo doble simétrico, el cual corresponde a un problema elemental pero muy instructivo acerca de esta simetría [1,2].

## 2. Dos potenciales y más

### 2.1. Pozo doble de potencial finito

Consideremos una partícula de masa  $\mu$  sometida a un potencial unidimensional  $V_0(x)$ , simétrico respecto al origen, como se muestra en la Fig. 1

La ecuación estacionaria de Schrödinger para las regiones I y III es

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x) \Rightarrow \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -k^2 \psi(x)$$

con  $k^2 = (2\mu/\hbar^2)E$ , así las soluciones en estas regiones están dadas por:

región I ( $-l < x < -b/2$ )

$$\psi_I(x) = A \text{sen}(k(x+l)),$$

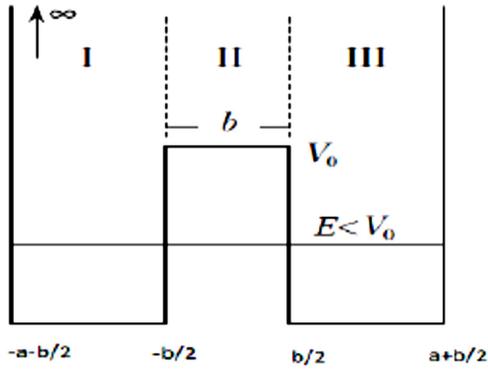


FIGURA 1. Pozo doble simétrico [2].

región III ( $b/2 < x < l$ )

$$\psi_{III}(x) = D \text{sen}(k(x - l)),$$

en donde  $l = a + (b/2)$ .

Para la región II ( $-b/2 < x < b/2$ ) la ecuación de Schrödinger está dada como sigue

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V_0(x)\psi(x) &= E\psi(x) \\ \Rightarrow \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) &= q^2 \psi(x), \end{aligned}$$

donde,  $q^2 = (-2\mu/\hbar^2)(E - V_0(x))$  con  $q > 0$  puesto que  $E < V_0(x)$  según se observa en la Fig. 1, y la solución para esta región es

$$\psi_{II}(x) = B \exp(qx) + C \exp(-qx).$$

Por otro lado, como el problema satisface la condición (1), estas soluciones deben tener una paridad bien definida, por lo tanto tendremos dos tipos de soluciones: la solución simétrica y la solución antisimétrica. Aún más, éstas estarán determinadas por las relaciones entre los coeficientes, respetando la continuidad de la función de onda y de sus derivadas.

**SOLUCIÓN SIMÉTRICA**

$$\psi_s(-x) = \psi_s(x) \Leftrightarrow A_s = -D_s \quad \& \quad B_s = C_s,$$

Así

$$\psi(x) = \begin{cases} A_s \text{sen}(k(x + l)) & -l < x < -\frac{b}{2} \\ 2B_s \cosh(qx) & -\frac{b}{2} < x < \frac{b}{2} \\ -A_s \text{sen}(k(x - l)) & \frac{b}{2} < x < l \end{cases} \quad (2)$$

La relación entre los coeficientes en la Ec. (2) se encuentra al aplicar las condiciones de continuidad en los puntos  $|x| = b/2$ .

Ahora bien, de la continuidad de  $\psi_s(x)$  y la continuidad de la  $(d\psi_s(x)/dx)$ , se obtienen las siguientes ecuaciones; en  $x = -b/2$ :

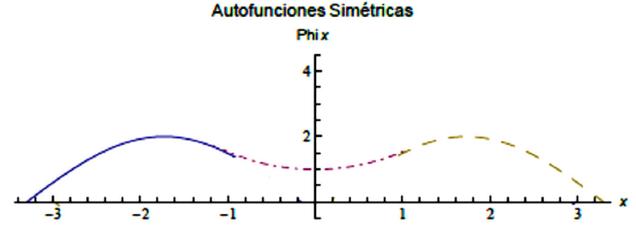


FIGURA 2. Representación gráfica de los estados simétricos. Línea rígida: región I, línea guión-punto: región II, Línea guión: región III.

Continuidad de  $\psi_s(x)$

$$A_s \text{sen}(ka) = 2B_s \cosh\left(\frac{qb}{2}\right) \quad (2a)$$

$$\Rightarrow B_s = \frac{1}{2} A_s \frac{\text{sen}(ka)}{\cosh\left(\frac{qb}{2}\right)}. \quad (2b)$$

De la continuidad de la  $d\psi_s(x)/dx$ ,

$$A_s k \cos(ka) = -2B_s q \text{senh}\left(\frac{qb}{2}\right) \quad (2c)$$

$$\Rightarrow B_s = -\frac{1}{2} A_s \frac{k}{q} \frac{\cos(ka)}{\text{senh}\left(\frac{qb}{2}\right)} \quad (2d)$$

Al igualar (2b) & (2d) se obtiene la ecuación de cuantización para los estados simétricos:

$$\frac{1}{k} \tan(ka) = -\frac{1}{q} \coth\left(\frac{qb}{2}\right), \quad (2e)$$

Esta condición se encuentra representada en la Fig. 3 en términos del número de onda  $k$ . La solución de esta ecuación está determinada por la intersección de las curvas.

**SOLUCIÓN ANTISIMÉTRICA**

$$\psi_a(-x) = -\psi_a(x) \Leftrightarrow A_a = D_a \quad \text{y} \quad B_a = -C_a,$$

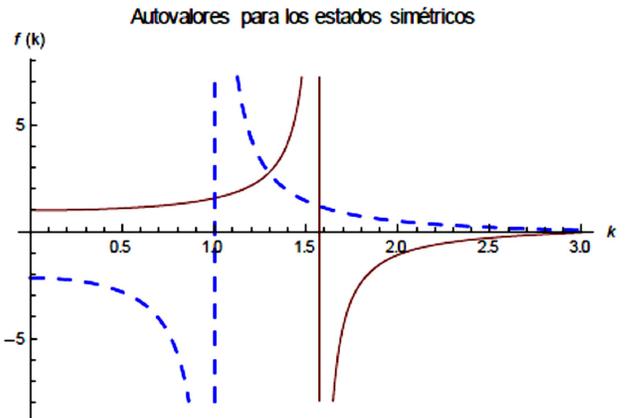


FIGURA 3. Los puntos de intersección determinan el valor permitido para la energía del estado simétrico. Línea punteada  $f(k) = -(1/(1 - k^2)^{1/2}) \coth((1 - k^2)^{1/2}/2)$ . Línea sólida  $f(k) = (1/k) \tan k$ .  $a = b = 1$ ,  $(2\mu/\hbar^2)V_0(x) = 1$ .

Así

$$\psi_a(x) = \begin{cases} A_a \text{sen}(k(x+l)) & -l < x < -\frac{b}{2} \\ 2B_a \text{senh}(qx) & -\frac{b}{2} < x < \frac{b}{2} \\ A_a \text{sen}(k(x+l)) & \frac{b}{2} < x < l \end{cases} \quad (3)$$

De manera análoga a los estados simétricos, consideramos la condición de continuidad para la función de onda y su derivada en  $x = -b/2$  (es importante destacar que el resultado es el mismo al considerar el punto  $x = b/2$ ).

Continuidad de  $\psi_a(x)$

$$A_a \text{sen}(ka) = -2B_a \text{senh}\left(\frac{qb}{2}\right) \quad (3a)$$

$$\Rightarrow B_a = -\frac{1}{2}A_a \frac{\text{sen}(ka)}{\text{senh}\left(\frac{qb}{2}\right)} \quad (3b)$$

Continuidad de la derivada de  $\psi_a(x)$

$$A_a k \cos(ka) = 2B_a q \cosh\left(\frac{qb}{2}\right) \quad (3c)$$

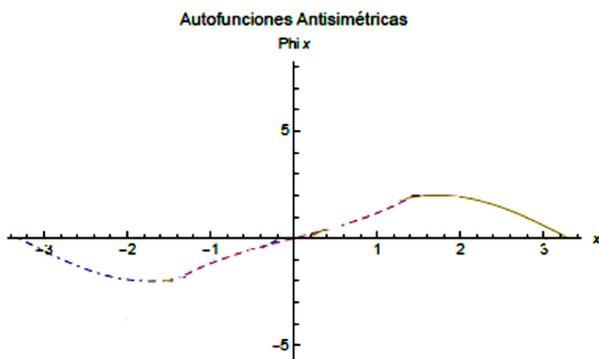


FIGURA 4. Representación gráfica de los estados antisimétricos. Punto-guión: región I, Guión: región II, Sólido: región III.

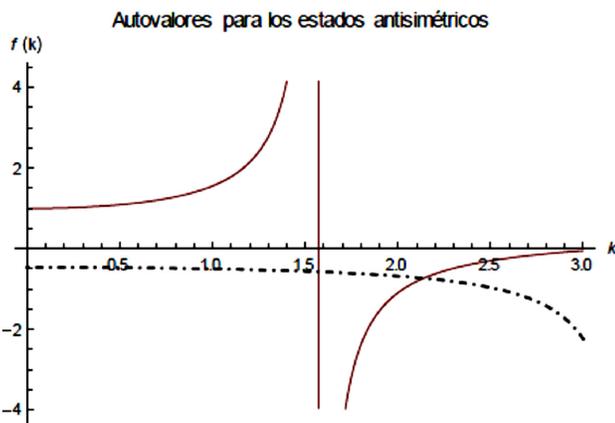


FIGURA 5. Los puntos de intersección corresponden al valor permitido para la energía del estado antisimétrico. Línea guión-punto  $f(k) = -(1/(1 - k^2)^{1/2}) \tanh((1 - k^2)^{1/2}/2)$ . Línea sólida  $f(k) = (1/k) \tan k$ .  $a = b = 1$ ,  $(2\mu/\hbar^2)V_0(x) = 1$ .

así que

$$B_a = \frac{1}{2}A_a \frac{k \cos(ka)}{q \cosh\left(\frac{qb}{2}\right)} \quad (3d)$$

Al igualar (3b) & (3d)

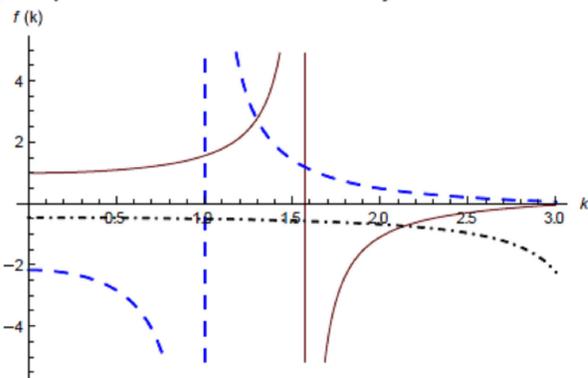
$$\frac{1}{k} \tan(ka) = -\frac{1}{q} \tanh\left(\frac{qb}{2}\right), \quad (3e)$$

se encuentra la condición de cuantización para los estados antisimétricos la cual se ilustra en la Fig. 5.

En las Figs. 6 mostramos, para su comparación, los valores de las energías permitidas  $E_s$  y  $E_a$ , a través de  $k$ , para dos valores diferentes de potencial.

Al comparar las Figs. 6a y 6b, se puede apreciar que hay un corrimiento en los valores de la energía. Más adelante ilustraremos gráficamente, el comportamiento de las energías  $E_s$

a) Comparación de los autovalores simétricos y antisimétricos



b) Comparación  $E_s$  y  $E_a$  para un potencial 4 veces superior al anterior

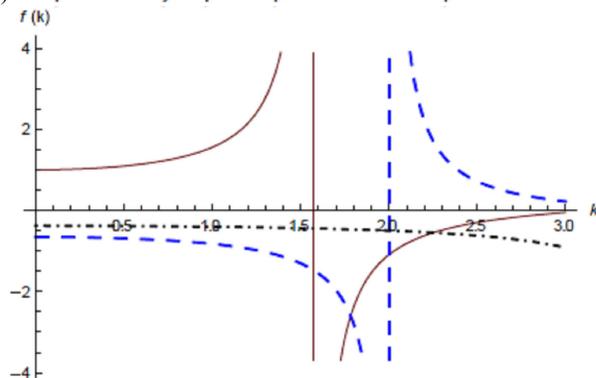


FIGURA 6. Los puntos de intersección determinan los valores permitidos para las energías asociadas a los estados simétricos y antisimétricos en términos de  $k$ . Línea sólida  $f(k) = (1/k) \tan k$ , a) línea punteada  $f(k) = -(1/(1 - k^2)^{1/2}) \coth((1 - k^2)^{1/2}/2)$ , línea punto-guión  $f(k) = -(1/(1 - k^2)^{1/2}) \tanh((1 - k^2)^{1/2}/2)$ .  $a = b = (2\mu/\hbar^2)V_0(x) = 1$ . b) línea punteada  $f(k) = -(1/(4 - k^2)^{1/2}) \coth((4 - k^2)^{1/2}/2)$ , línea punto-guión  $f(k) = -(1/(4 - k^2)^{1/2}) \tanh((4 - k^2)^{1/2}/2)$ .  $a = b = 1$ ,  $(2\mu/\hbar^2)V_0(x) = 4$ .

y  $E_a$  en términos de la evolución de las condiciones de cuantización, en relación al potencial.

Por el momento, nos ocupamos de las condiciones de cuantización dadas en las Ecs. (2e) y (3e), con el propósito de analizar, analíticamente, las circunstancias en las que se presenta la degeneración cuántica, es decir  $E_a = E_s$ .

La Ec. (2e) equivale a

$$\tan(ka) = -\left(\frac{k}{q}\right) \coth\left(\frac{b}{q}\right) = -\left(\frac{k}{q}\right) \frac{e^{\frac{qb}{2}} + e^{-\frac{qb}{2}}}{e^{\frac{qb}{2}} - e^{-\frac{qb}{2}}},$$

y la (3e)

$$\tan(ka) = -\left(\frac{k}{q}\right) \tanh\left(\frac{b}{q}\right) = -\left(\frac{k}{q}\right) \frac{e^{\frac{qb}{2}} - e^{-\frac{qb}{2}}}{e^{\frac{qb}{2}} + e^{-\frac{qb}{2}}}.$$

Ellas difieren en los signos, pero se las puede escribir de manera simultánea como sigue

$$\tan(ka) = -\left(\frac{k}{q}\right) \frac{e^{\frac{qb}{2}} \pm e^{-\frac{qb}{2}}}{e^{\frac{qb}{2}} \mp e^{-\frac{qb}{2}}}.$$

A cada simetría le corresponde un signo. El signo superior (inferior) es para el caso simétrico (antisimétrico). Desarrollando la parte derecha de la ecuación anterior

$$\frac{e^{\frac{qb}{2}} \pm e^{-\frac{qb}{2}}}{e^{\frac{qb}{2}} \mp e^{-\frac{qb}{2}}} = -\frac{\left(e^{\frac{qb}{2}} \pm e^{-\frac{qb}{2}}\right)^2}{2 \sinh(qb)},$$

obtenemos

$$\tan(ka) = -\left(\frac{k}{q}\right) \frac{(e^{qb} \pm 2 + e^{-qb})}{2 \sinh(qb)} = -\frac{k}{q} \frac{(\cosh qb \pm 1)}{\sinh(qb)}.$$

Ahora bien, si:  $(2\mu/\hbar^2)V_0 \gg k^2$  y  $q^2 \gg k^2$  pues  $q^2 = -k^2 + (2\mu/\hbar^2)V_0 \Rightarrow q^2 \simeq (2\mu/\hbar^2)V_0$ , entonces en este límite

$$\begin{aligned} \frac{(\cosh qb \pm 1)}{(\sinh(qb))} &= \frac{(e^{qb} + e^{-qb}) \pm 2}{(e^{qb} - e^{-qb})} \\ &\simeq \frac{e^{qb} \pm 2}{e^{qb}} = 1 \pm 2e^{-qb}. \end{aligned}$$

Por lo tanto, cuando el potencial es grande comparado con la energía

$$\frac{1}{ka} \tan(ka) = -\frac{1}{a} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2\mu V_0}} \left(1 \pm \frac{1}{2} e^{-\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2} V_0} b}\right).$$

En el límite  $V_0 \rightarrow \infty$

$$\tan(ka) \simeq -\frac{1}{a} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2\mu V_0}} \Rightarrow \tan(ka) \rightarrow 0.$$

Por lo tanto a medida que crece el potencial, las energías se van acercando mucho una a la otra, llevando al fenómeno de degeneración o equivalentemente  $ka \simeq n\pi$  [2] como en el caso del potencial infinito.

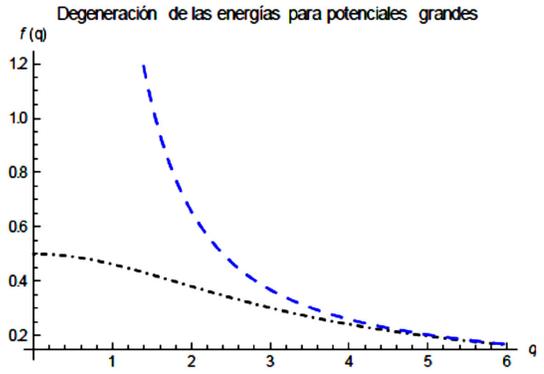


FIGURA 7. Comparación de las funciones que determinan la energía para los estados simétricos y antisimétricos. Línea punteada  $f(q) = (1/q) \coth(q/2)$ , Ec. (2e). Línea punto-guion  $f(q) = (1/q) \tanh(q/2)$  Ec. (3e).  $b = 1$ .

Si comparamos las condiciones de cuantización obtenidas en el caso simétrico (2e) y antisimétrico (3e) (el lado derecho de estas ecuaciones), se observa en la Fig. 7, que aparece un acercamiento entre los valores de las funciones que determinan la cuantización de la energía a medida que  $q$  y por ende el potencial  $V_0(x)$  crecen, hasta el límite en el que éstas coinciden, presentándose la degeneración cuántica. Es importante destacar que en el límite en el que el potencial es infinito, la naturaleza del problema cambia radicalmente, ya no se presenta el efecto túnel, es decir, los pozos son incapaces de comunicarse, por lo tanto, el problema se transforma en el de dos pozos completamente independientes, y debido al aislamiento no se manifiesta una degeneración.

## SUPERPOSICIÓN DE ESTADOS

Consideremos ahora que el sistema se encuentra en los estados:  $\psi_s(x) + \psi_a(x)$  y  $\psi_s(x) - \psi_a(x)$ , que por sus características los denotaremos como  $\psi_L(x)$  y  $\psi_R(x)$  respectivamente, dado que en estos nuevos estados la partícula se encuentra del lado izquierdo  $-l < x < -b/2$  (zona I), o del lado derecho  $b/2 < x < l$  (zona III) de la Fig. 1, de acuerdo a, a).

$$\psi_L(x) = [\psi_s(x) + \psi_a(x)]$$

$$\psi_L(x) = \begin{cases} 2A_s \sin(k(x+l)) & -l < x < -\frac{b}{2} \\ 2(B_a \sinh(qx) + B_s \cosh(qx)) & -\frac{b}{2} < x < \frac{b}{2} \\ 0 & \frac{b}{2} < x < l \end{cases}$$

Sustituyendo los valores de los coeficientes  $B_s$  y  $B_a$ , (2b) y (3b), en términos de  $A_s$  tenemos

$$\psi_L(x) = \begin{cases} 2A_s \sin(k(x+l)) & -l < x < -\frac{b}{2} \\ A_s \sin(ka) \left[ \frac{\cosh(qx)}{\cosh(\frac{qb}{2})} - \frac{\sinh(qx)}{\sinh(\frac{qb}{2})} \right] & -\frac{b}{2} < x < \frac{b}{2} \\ 0 & \frac{b}{2} < x < l \end{cases} \quad (4)$$

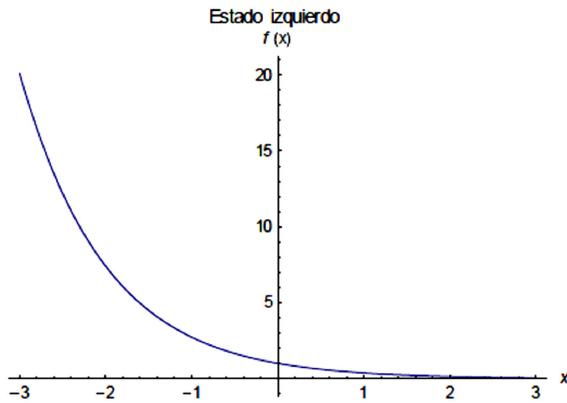


FIGURA 8. Representación gráfica, en la zona II, del estado izquierdo  $f(x) = \cosh(qx) - \sinh(qx)$ .

Graficando la solución de la zona II de la Fig. 1, es decir, la parte central de esta ecuación, podemos observar que el comportamiento corresponde a una acumulación del sistema en el lado izquierdo.

Para b)  $\psi_R(x) = [\psi_s(x) - \psi_a(x)]$

$$\psi_R(x) = \begin{cases} 0 & -l < x < -\frac{b}{2} \\ 2(B_s \cosh(qx) - B_a \sinh(qx)) & -\frac{b}{2} < x < \frac{b}{2} \\ 2A_s \sin(k(x+l)) & \frac{b}{2} < x < l \end{cases},$$

y al sustituir los coeficientes  $B_s$  y  $B_a$ ,

$$\psi_R(x) = \begin{cases} 0 & -l < x < -\frac{b}{2} \\ A_s \sin(ka) \left[ \frac{\cosh(qx)}{\cosh(\frac{qb}{2})} + \frac{\sinh(qx)}{\sinh(\frac{qb}{2})} \right] & -\frac{b}{2} < x < \frac{b}{2} \\ -2A_s \sin(k(x-l)) & \frac{b}{2} < x < l \end{cases}, \quad (5)$$

Se ve que la acumulación se da en el lado derecho, y la solución en la zona II se ilustra en la Fig. 9.

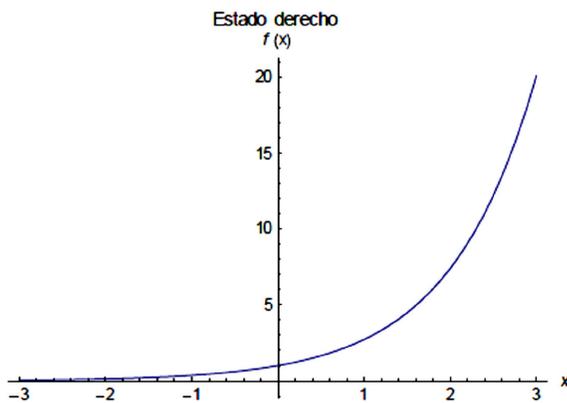


FIGURA 9. Representación gráfica, en la zona II, del estado derecho  $f(x) = \cosh(qx) + \sinh(qx)$ .

Ahora resulta que estos nuevos estados no son eigenestados del operador de paridad, de hecho al aplicar el operador de paridad a los estados  $\psi_L(x)$  y  $\psi_R(x)$ , estos son intercambiados, y estos estados tampoco son eigenestados de la energía.

Vamos a asumir que al tiempo  $t=0$  el sistema se encuentra en el estado  $\psi_L(x, t = 0)$ . Si queremos saber cómo ha evolucionado este estado temporalmente, utilizamos el operador de evolución temporal

$$\begin{aligned} \psi_L(x, t) &= e^{-\frac{iE_s t}{\hbar}} \psi_s(x) + e^{-\frac{iE_A t}{\hbar}} \psi_A(x) \\ &= e^{-\frac{iE_s t}{\hbar}} \left[ \psi_s(x) + e^{-\frac{i(E_A - E_s)t}{\hbar}} \psi_A(x) \right] \end{aligned} \quad (6)$$

Notamos que el sistema oscila con una frecuencia

$$\omega = \frac{(E_A - E_s)}{\hbar}. \quad (7)$$

Cuando transcurre un lapso de tiempo igual a la mitad del periodo  $T = 2\pi\hbar/(E_A - E_s)$  el sistema sufre una transición y se encuentra en un estado puro derecho  $\psi_R$  y al tiempo  $T$  regresa al estado  $\psi_L$ , así el sistema se encuentra oscilando, entre  $\psi_R$  y  $\psi_L$  indefinidamente [1]. Debido a la naturaleza cuántica del problema, la partícula puede atravesar la región clásicamente prohibida y cambiar de un estado a otro.

Ahora nos preguntamos ¿Qué sucede si la barrera de potencial finita  $V_0(x)$  se torna casi infinita? Cuando esto sucede, como analizamos anteriormente, a los estados  $\psi_s(x)$  y  $\psi_a(x)$  les corresponde la misma energía, son estados degenerados, y aunque sean eigenestados de la energía, ya dejan de serlo para la paridad y ya no hay posibilidad de tunelaje a través de la barrera. Una vez que el sistema se encuentre en el lado derecho o izquierdo ahí permanecerá para siempre. Se ha roto la simetría.

### 2.2. Pozo doble tipo delta de Dirac

Vamos a enfocar ahora nuestra atención en un problema análogo al estudiado anteriormente.

Consideramos el estudio del comportamiento cuántico de una partícula de masa  $\mu$  sujeta a un potencial unidimensional del tipo:

$$V(x) = -\frac{\hbar^2 P}{\mu} \delta(x^2 - a^2) \quad (8)$$

Donde  $P$  es una constante adimensional positiva que representa a la profundidad de los pozos de potencial,  $\delta(x)$  es la función delta de Dirac y  $a$  es una longitud constante. Ver Apéndice y Fig. 10.

El propósito es entender con detalle el problema, y al igual que en el problema anterior, formular las soluciones analíticas (estados ligados) en función de  $P$ . Este problema además de interesante, es útil por sus importantes aplicaciones prácticas y posible entendimiento de la presencia de algunos materiales asimétricos (moléculas orgánicas e isómeros ópticos) que existen en la naturaleza.

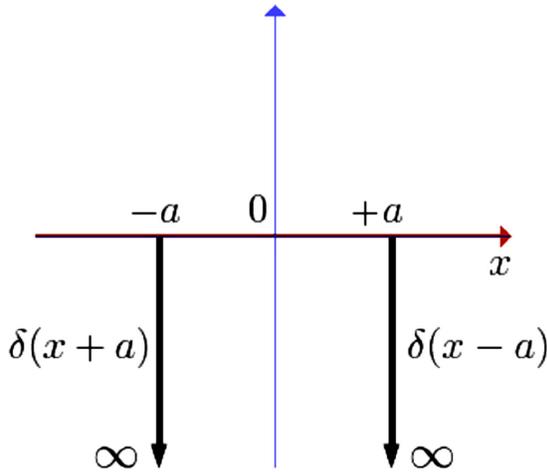


FIGURA 10. Pozo doble delta de Dirac [3].

Las soluciones explícitas de la ecuación de Schrödinger  $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$  ( $\hat{H} = (\hat{p}^2/2\mu) + V(x)$ ), para el potencial (8), el cual es simétrico ante la transformación  $\hat{\pi}$  (de paridad)  $\hat{\pi}V(x) = V(-x) = V(x)$ , son también eigenfunciones de este operador, es decir, son soluciones de tipo simétrico o antisimétrico.

La Solución Simétrica  $\psi_S(x)$ , tal que  $\hat{\pi}_s(x) = \psi_s(x) = +\psi_s(x)$ , está dada por

$$\psi_s(x) = \begin{cases} A_s \exp(kx) & x < -a \\ 2B_s \cosh(kx) & -a < x < a \\ A_s \exp(-kx) & x > a \end{cases} \quad (9)$$

Aquí  $k^2 = -2\mu E/\hbar^2$ , para estados ligados  $E < 0$ .

Esta solución (ver Fig. 11), debe satisfacer la condición de continuidad en  $x = \pm a$ , por lo que  $B_S = (1/2)A_S(\exp(-ka)/\cosh(ka))$ .

La condición de cuantización para la energía  $E_S$ , en este caso, surge al considerar la discontinuidad de las derivadas (nótese que en esta condición el problema difiere del anterior) en los puntos  $x = \pm a$ , debido a las características de la función delta de Dirac (Ver apéndice). La condición de cuantización ahora resulta

$$\tanh(ka) = \left(\frac{P}{ak} - 1\right), \quad (10)$$

La Solución Antisimétrica  $\psi_A(x)$ , tal que  $\hat{\pi}\psi(x) = -\psi_A(x)$ , está dada por

$$\psi_A(x) = \begin{cases} A_s \exp(kx) & x < -a \\ 2B_A \sinh(kx) & -a < x < a \\ -A_s \exp(-kx) & x > a \end{cases} \quad (11)$$

Esta solución, satisface la condición de continuidad en  $x = \pm a$ , por lo tanto  $B_A = -(1/2)A_S(\exp(-ka)/\sinh(ka))$ . (Ver Fig. 12).

La condición de cuantización asociada a  $E_A$  también surge al considerar la discontinuidad de las derivadas en  $x = \pm a$  y resulta (Ver apéndice)

$$\coth(ka) = \left(\frac{P}{ka} - 1\right). \quad (12)$$

Es interesante analizar la solución gráfica simultánea de las condiciones de cuantización para las Ecs. (10) y (12) (Fig. 13), asociadas a los estados  $\psi_S(x)$  y  $\psi_A(x)$ . En esta figura, el eje vertical corresponde al valor de  $P$ . Se nota que las energías asociadas al estado  $\psi_A(x)$  y al estado  $\psi_S(x)$ , satisfacen la relación  $E_A > E_S$  y se van acercando a medida que la profundidad del potencial  $P$  va aumentando. Es decir, para cierta profundidad existe una degeneración en la energía  $E_A \rightarrow E_S$ . Esto tiene una repercusión importante asociada a los autoestados de la simetría de paridad.

Consideremos en este momento que el sistema se encuentra en un estado relacionado con la suma de las soluciones Simétrica y Antisimétrica,

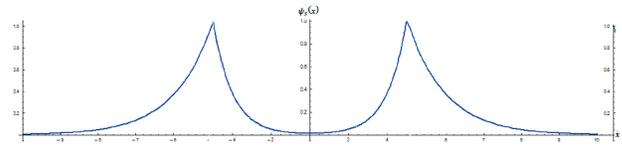


FIGURA 11. Representación gráfica de los estados simétricos, para un potencial tipo (8).

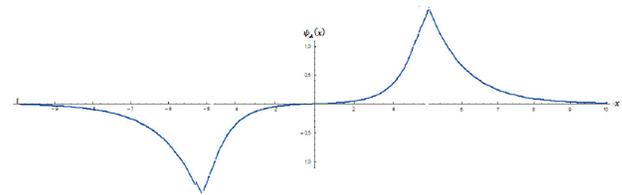


FIGURA 12. Representación gráfica de los estados antisimétricos para un potencial del tipo (8), para  $A_S < 0$ .

Comparación de las energías simétricas y antisimétricas

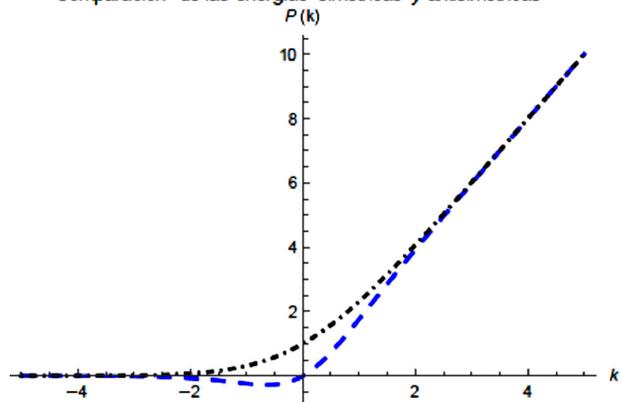


FIGURA 13. Gráfica simultánea de las condiciones de cuantización para los estados simétrico, línea punteada Ec. (10) y antisimétrico, línea punto-guión, Ec. (12).  $P$  corresponde a la profundidad del potencial.

$$\psi_L(x) = [\psi_s(x) + \psi_a(x)]$$

$$\psi_L = \begin{cases} 2A_s \exp(kx) & x < -a \\ 2(B_s \cosh(kx) + B_A \sinh(kx)) & -a < x < a \\ 0 & x > a \end{cases}$$

Sustituyendo los valores

$$B_s = \frac{1}{2} A_s \frac{\exp(-ka)}{\cosh(ka)}, \quad B_A = -\frac{1}{2} A_s \frac{\exp(-ka)}{\sinh(ka)},$$

$$\psi_L = \begin{cases} 2A_s \exp(kx) & x < -a \\ 2 \exp(-ka) \left( \frac{\cosh(kx)}{\cosh(ka)} - \frac{\sinh(kx)}{\sinh(ka)} \right) & -a < x < a \\ 0 & x > a \end{cases} \quad (13)$$

Ahora, para  $\psi_R(x) = [\psi_s(x) - \psi_a(x)]$  se obtiene

$$\psi_R = \begin{cases} 0 & x < -a \\ 2(B_s \cosh(kx) - B_A \sinh(kx)) & -a < x < a \\ 2A_s \exp(kx) & x > a \end{cases}$$

la cual se reduce a

$$\psi_R = \begin{cases} 0 & x < -a \\ 2 \exp(-ka) \left( \frac{\cosh(kx)}{\cosh(ka)} + \frac{\sinh(kx)}{\sinh(ka)} \right) & -a < x < a \\ 2A_s \exp(-kx) & x > a \end{cases} \quad (14)$$

Las funciones  $\psi_R(x)$  y  $\psi_L(x)$  satisfacen correctamente las condiciones de continuidad en  $x = \pm a$ .

Estos nuevos estados  $\psi_R(x)$  y  $\psi_L(x)$  se concentran en el lado derecho e izquierdo respectivamente, más aún, la parte central de  $\psi_R(x)$  y  $\psi_L(x)$ , tiene exactamente el mismo comportamiento que el del problema del pozo doble finito de potencial simétrico, con lo que podemos afirmar que el comportamiento en los dos problemas es análogo en general, por lo tanto, estos estados tampoco son autoestados del operador de paridad y ante el operador de paridad se transforman uno en el otro, y por lo tanto, estos nuevos estados no estacionarios, estarán oscilando con una frecuencia  $\omega = (E_A - E_S/\hbar)$  (las energías  $E_s$  y  $E_A$  están dadas a través de las Ecs. (10) y (12) respectivamente).

Como se trató anteriormente, a medida que la profundidad de los pozos aumenta las energías se acercan una a la otra y el sistema se “degenera”  $E_A = E_S$  desapareciendo la oscilación. En este caso, tanto  $\psi_L(x, t)$  como  $\psi_R(x, t)$  son autoestados de la energía, a pesar de que siguen sin ser autoestados de la Paridad. Estos estados permanecerán un tiempo infinito sin cambiar. La asimetría subsiste eternamente. Nuevamente la simetría de paridad ha sido rota. Lo anterior es posible a pesar de la simetría del Hamiltoniano y de que los operadores de energía y paridad conmuten entre sí  $[\hat{\pi}, \hat{H}] = \hat{0}$ . Estos operadores ya no comparten autoestados. Estos resultados son consistentes con el siguiente teorema de la mecánica cuántica:

---

**Teorema** Suponga que  $[\hat{\pi}, \hat{H}] = \hat{0}$ , y que  $\psi_n(x)$  es un eigenestado no-degenerado de  $\hat{H}$  con eigenvalor  $E_n$ ,

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n. \quad (15)$$

Entonces  $\psi_n$  es también un eigenestado de la paridad.

Sin embargo, cuando hay degeneración se rompe la simetría de paridad.

Las consecuencias prácticas del comportamiento de las funciones de onda, para los potenciales estudiados, se manifiestan en algunas moléculas orgánicas, en particular nos enfocamos en la molécula de amoníaco  $\text{NH}_3$ , la cual está compuesta por un átomo de nitrógeno y tres átomos de hidrógeno formando una pirámide.

La interacción entre el átomo de nitrógeno y los de hidrógeno de esta molécula puede modelarse mediante un doble potencial de oscilador (similar a los aquí tratados) como se muestra en la Fig. 14 [4]. En las soluciones que hemos presentado, detallamos el comportamiento de los sistemas en las zonas clásicamente prohibidas, es decir, zonas en las cuales la energía total es inferior al valor del potencial  $E < V$  y mostramos que sí existe una probabilidad de ocupar o atravesar esa zona por efecto túnel, puramente cuántico.

Como se mostró en los casos anteriores, los estados, dada la simetría del potencial (en este caso, relativa al plano formado por los átomos de hidrógeno), son autoestados simultáneos del Hamiltoniano  $\hat{H}$  y de la paridad  $\hat{\pi}$  con energías

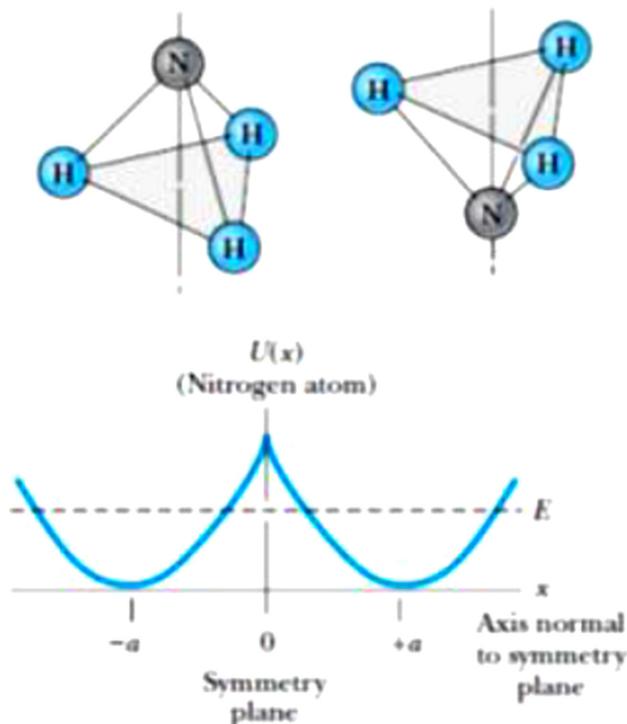


FIGURA 14. Potencial de interacción entre los átomos de la molécula de amoníaco [4].

diferentes, ellos son el estado simétrico  $\psi_s(x)$  con energía  $E_s$  y el antisimétrico  $\psi_a(x)$  con energía  $E_a$ .

En ambos casos, las probabilidades  $|\psi_{(s,a)}(x)|^2$  máximas para localizar al átomo de Nitrógeno N se encuentran en  $x = \pm a$  como lo sugieren las Figs. 2 y 4.

En la naturaleza, la molécula de amoníaco en equilibrio, se encuentra en dos configuraciones diferentes como lo muestra la Fig. 14. En una de ellas N se encuentra en  $x = -a$  y en la otra en  $x = a$  es decir, abajo o arriba del plano de simetría. En otras palabras, el sistema se encuentra en los estados  $\psi_L(x)$  ó  $\psi_R(x)$ . Por efecto túnel el nitrógeno atraviesa la barrera de potencial una y otra vez pasando, al transcurrir el tiempo, de una configuración a la otra con una frecuencia determinada en (7) proporcional a la diferencia de energías entre la del estado base  $E_s$  y la del primer estado excitado  $E_a$ , que corresponde a una frecuencia de oscilación de 24,000 MHz [1] que se encuentra en la región de microondas. En un gas de estas moléculas se encuentran, en igual proporción, estados en ambas configuraciones y es mediante un campo eléctrico no uniforme que es posible separar los átomos en estado base de los que se encuentran en el estado excitado. Así se produce una gran concentración de moléculas excitadas, las necesarias para que al des-excitarde de manera espontánea, se induzca en cascada, la emisión de radiación coherente (fotones de igual frecuencia) [5].

A la fuente de radiación coherente en forma de microondas se la conoce como “máser” (siglas de amplificación de microondas mediante la emisión estimulada de radiación). El máser, en efecto, produce una emisión coherente de micro-

ondas; esto es, radiación altamente concentrada, de una única longitud de onda.

Aparte de la utilidad cotidiana del máser, las microondas se encuentran presentes en importantes experimentos científicos, en particular, en una primera prueba exitosa de un dispositivo para fusión realizada en el Instituto Max Planck en Greifswald, Alemania [6]. Este experimento podría ser un inicio para la generación de energía nuclear renovable, barata, limpia y segura, a través de la fusión nuclear. En este experimento fueron usados un equivalente a 6000 hornos de microondas para fusionar átomos de hidrógeno y producir un plasma que sería la fuente de producción de energía nuclear. Es importante señalar también que el efecto túnel, es esencial para la operación de muchos dispositivos modernos que influyen en nuestro mundo, en una escala desde la atómica hasta escalas de proporciones galácticas. En este trabajo hemos mostrado, particularmente, el papel que juega este efecto en la operación de máser de amoníaco.

### 3. Conclusiones

Al comparar las Figs. 2 y 11, asociadas a los estados simétricos del pozo doble finito y del pozo doble delta de Dirac, respectivamente, observamos que el comportamiento ante ambos potenciales es en esencia el mismo, sin embargo, como se aprecia en las figuras, la diferencia radica en la suavidad de las curvas para el primer caso y en los picos asociados a la discontinuidad de la derivada del segundo caso; este mismo razonamiento se sigue para los estados antisimétricos y para el tercer caso relacionado con el  $\text{NH}_3$ .

Es importante señalar que al comparar las Figs. (7) y (13), se observa que expresan el mismo comportamiento, esto es, las energías asociadas a los estados simétricos y antisimétricos se acercan conforme la profundidad del pozo crece, es decir, aparece degeneración para potenciales muy grandes (sin considerar el caso límite en el infinito, pues si esto ocurre, como ya se mencionó antes, los pozos se vuelven independientes).

Mostramos que cuando se superponen los estados simétricos y antisimétricos obtenidos, se rompe la simetría, lo cual en un principio podría causar cierta conmoción, sin embargo, como se ha mostrado en el desarrollo de los estados derecho e izquierdo, es gracias a la formación de estos estados que se puede dar origen a ciertos fenómenos físicos, o más bien, a la correcta descripción de fenómenos que observamos comúnmente en la naturaleza. Así la simetría debe romperse para dar lugar a cosas nuevas, y de aquí, ya no resulta tan extraño suponer por qué el azúcar que endulza nuestro café por las mañanas tiene orientación izquierda, o que nuestro corazón se encuentre del lado izquierdo de nuestro cuerpo. Finalmente, este trabajo intenta por un lado, mostrar la importancia de la simetría y su rompimiento, y por otro lado destacar la importancia del efecto túnel, para con ambas herramientas, dar una explicación a esos pequeños detalles, que día a día están presentes en nuestro entorno, que pocas veces cuestionamos pues ya los damos por hecho, pero que

es con base en estas sutilezas que el mundo funciona tal como lo conocemos.

### Apéndice

#### A. La función delta $\delta(x)$ de Dirac

La función delta de Dirac de acuerdo a la Fig. A.1 [7]:

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \delta^{(\varepsilon)}(x) \tag{A.1}$$

También puede ser definida mediante la siguiente ecuación integral:

$$\int_a^b f(x)\delta(x - x_0)dx = \begin{cases} f(x_0), & \text{si } a < x < b \\ 0, & \text{Caso contrario} \end{cases} \tag{A.2}$$

Otra propiedad de la función delta de Dirac para el potencial de la Ec. (8), que hemos considerado aquí es,

$$\delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{|2a|}[\delta(x - a) + \delta(x + a)], \quad a \neq 0. \tag{A.3}$$

#### DEMOSTRACIÓN DE LA ECUACIÓN (10)

Para tratar la discontinuidad de la derivada de la función de onda asociada a los estados simétricos se procede de la siguiente forma.

Consideramos la ecuación de Schrödinger para el potencial (8),

$$\begin{aligned} &-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi_s}{dx^2} \\ &-\frac{P\hbar^2}{2\mu a}(\delta(x - a) + \delta(x + a))\psi_s = E\psi_s \end{aligned} \tag{A.4}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow &\frac{d^2\psi_s}{dx^2} + \frac{P}{a}(\delta(x - a) \\ &+ \delta(x + a))\psi_s = -\frac{2\mu}{\hbar^2}E\psi_s \end{aligned} \tag{A.5}$$

Al integrar la Ec. (A.5) alrededor de una vecindad de radio  $\varepsilon$ , en  $x = a$ , y tomando el límite cuando  $\varepsilon \rightarrow 0$ ,

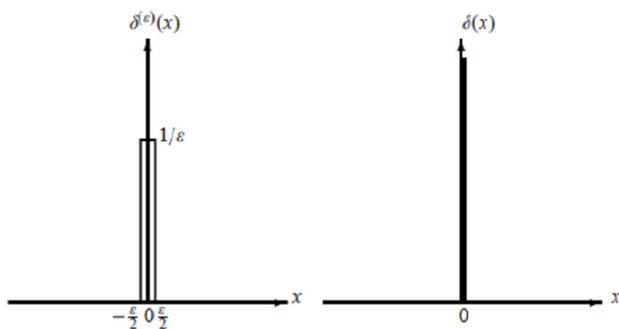


FIGURA A.1. La función delta  $\delta(x)$  está definida por  $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \delta^{(\varepsilon)}(x)$ .

$$\begin{aligned} &\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \frac{d^2\psi_s(x)}{dx^2} dx + \frac{P}{a} \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} (\delta(x - a) + \delta(x + a))\psi_s(x) dx = 0 \\ &\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left( \frac{d\psi_s(a + \varepsilon)}{dx} - \frac{d\psi_s(a - \varepsilon)}{dx} \right) + \frac{P}{a} \psi_s(a) = 0 \end{aligned} \tag{A.6}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow &-kA_s e^{-ka} - 2kB_s \sinh(ka) + \frac{P}{a} A_s e^{-ka} = 0 \\ \Rightarrow &A_s \left( \frac{P}{ka} - 1 \right) e^{-ka} = 2B_s \sinh(ka). \end{aligned} \tag{A.7}$$

Usado la integral la condición de continuidad de  $\psi_s(x)$  en  $x = a$ , que ahora se plantea de la siguiente manera

$$A_s e^{-ka} = 2B_s \cosh(ka). \tag{A.8}$$

Dividiendo (A.7) entre (A.8), se obtiene la ecuación de cuantización de los estados simétricos para un potencial del tipo (8) (Ec. 10),

$$\tanh(ka) = \left( \frac{P}{ka} - 1 \right)$$

#### DEMOSTRACIÓN DE LA ECUACIÓN 12

Para tratar la discontinuidad de la derivada de la función de onda asociada a los estados antisimétricos se procede de manera análoga al tratamiento de la discontinuidad de la derivada de la función de onda asociada a los estados simétricos y resulta:

$$\begin{aligned} &\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left( \frac{d\psi_A(x + \varepsilon)}{dx} - \frac{d\psi_A(x - \varepsilon)}{dx} \right) + \frac{P}{a} \psi_A(a) = 0 \tag{A.9} \\ &-kA_s e^{-ka} + 2kB_A \cosh(ka) + \frac{P}{a} A_s e^{-ka} = 0 \end{aligned}$$

$$A_s \left( \frac{P}{ka} - 1 \right) e^{-ka} = -2B_A \cosh(ka). \tag{A.10}$$

Por otro lado, la condición de continuidad de  $\psi_A(x)$  en  $x = a$ ,

$$A_s e^{-ka} = -2B_A \sinh(ka). \tag{A.11}$$

Dividiendo (A.10) entre (A.11), se obtiene la ecuación de cuantización de los estados antisimétricos para un potencial del tipo (8) (Ec. 12),

$$\coth(ka) = \left( \frac{P}{ka} - 1 \right).$$

#### Agradecimientos

S.R. Juárez W. agradece el apoyo proporcionado por la Secretaría de Investigación y Posgrado del Instituto Politécnico Nacional IPN y por la COFAA-IPN, México.

G.G. Fernández M. agradece el apoyo (beca) proporcionado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) para cursar la Maestría en Ciencias Fisicomatemáticas en la ESFM-IPN.

- 
1. J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Revised Edition (Addison-Wesley, 1994), pp. 256-259.
  2. Luis de la Peña, Mirna Villavicencio, *Problemas y ejercicios de Mecánica Cuántica*, Fondo de Cultura Económica, (Ediciones científicas universitarias 2003), pp. 102-106.
  3. <http://la-mecanica-cuántica.blogspot.mx/2009/08/el-potencial-delta-de-dirac.html>
  4. Serway/ Moses/ Moyer, *Modern Physics*, (Brooks/ Cole-Thomson Learning 2005), Chapter 9.
  5. R. Feynman, <http://www.feynmanlectures.caltech.edu/III.toc.html> Chapter 9.
  6. [http://www.ipp.mpg.de/4010154/02\\_16](http://www.ipp.mpg.de/4010154/02_16)
  7. N. Zettili, *Quantum Mechanics Concepts and Applications*, Wiley, Appendix A.