

**ACERCAMIENTO AL CONCEPTO DE ENERGIA CUANTIZADA POR MEDIO DEL
CÁLCULO DE LOS ESTADOS LIGADOS DE SISTEMAS MECANICO CUANTICOS
UNIDIMENSIONALES.**

Presentado por:
Eduardo Andrés Muñoz Reina

Asesor:
Profesor. Néstor Méndez Hincapié

Línea de profundización
Enseñanza de la Física y la Relación Física-Matemática.

**UNIVERSIDAD PEDAGOGICA NACIONAL
FACULTAD DE CIENCIA Y TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE FISICA
2016**

**ACERCAMIENTO AL CONCEPTO DE ENERGIA CUANTIZADA POR MEDIO DEL
CÁLCULO DE LOS ESTADOS LIGADOS DE SISTEMAS MECANICO CUANTICOS
UNIDIMENSIONALES.**

Trabajo de grado para obtener el título:
Licenciado en Física

Presentado por:
Eduardo Andrés Muñoz Reina

Asesor:
Profesor. Néstor Méndez Hincapié

Línea de profundización
Enseñanza de la Física y la Relación Física-Matemática.

**UNIVERSIDAD PEDAGOGICA NACIONAL
FACULTAD DE CIENCIA Y TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE FISICA
2016**

 UNIVERSIDAD PEDAGÓGICA NACIONAL Realidad en Formación	FORMATO	
	RESUMEN ANALÍTICO EN EDUCACIÓN - RAE	
Código: FOR020GIB	Versión: 01	
Fecha de Aprobación: 10-10-2012	Página 1 de 71	

1. Información General	
Tipo de documento	Trabajo de Grado
Acceso al documento	Universidad Pedagógica Nacional. Biblioteca Central
Título del documento	Acercamiento al concepto de energía cuantizado por medio del cálculo de los estados ligados de sistemas mecánico cuánticos unidimensionales.
Autor(es)	Muñoz Reina, Eduardo Andrés.
Director	Méndez Hincapié, Néstor.
Publicación	Bogotá. Universidad Pedagógica Nacional, 2016. 68 p.
Unidad Patrocinante	Universidad Pedagógica Nacional.
Palabras Claves	ESTADOS LIGADOS; CUANTIZACION DE LA ENERGIA; ECUACION DE SCHRÖDINGER; POZO DE POTENCIAL; PROGRAMACION C++; METODO NUMEROV.

2. Descripción
Trabajo de grado donde el autor busca mostrar la importancia de la programación y los métodos numéricos aplicados al problema de los estados ligados, la cuantización de la energía y los objetos usados en la descripción de sistemas donde se observan estos fenómenos, los pozos de potencial, sobre los cuales se trabajará los cálculos, la obtención de los datos de interés y en los cuales se basa la simulación. Esto con el objetivo último de entregar una herramienta computacional en la que se puede observar y evaluar cualquier tipo de pozo de potencial cuántico y sea un complemento en el estudio y visualización de dichos sistemas físicos.

3. Fuentes
- Alonzo. M, Finn. E. J. (1968) Quantum and Statistical Physics. Vol 3 Addison-Wesley Publishing Company. - Ballentine. Leslie E. (1998) Quantum Mechanics (A Modern Development) - Borowitz. S. (1973) Fundamentos de Mecánica cuántica- (partículas, Ondas y mecánica de ondas) Editorial Reverté S.A. - Burden. R, Faires. J. (2002) Análisis numérico séptima edición international Thomson editores S.A. - Eisberg- Resnick. (2009) Física cuántica (Átomos, moléculas, sólidos, núcleos partículas) LimusaWiley - Eyvind. H. Wichmann (1996) Física cuántica. Vol 4 (Berkeley physics course)editorial Reverté s.a.

- *García. M, Ewert. J. (2003) Introducción a la física moderna tercera edición- Unibiblos.*
- *Noguera. F, Rodríguez. V, Velasco. J. (2010) (Diseño de una arquitectura para la solución de Schrödinger usando el método de numerov) IBERCHIP foz do Iguazu Brazil.*
- *Téllez. A, transmisión y reflexión de partículas /2010/07/ recuperado de http://la-mecanica-cuantica.blogspot.com.co/transmision-y-reflexion-de-particulas_05.html(02/12/2015) [4]*
- *C ventajas/desventajas noviembre 2006. Recuperado de https://www.americati.com/doc/ventajas_c/ventajas_c.html(02/12/2015)*

4. Contenidos

En el capítulo 1 se presenta: la problemática y la importancia del trabajo en el estudio de la Mecánica Cuántica, los antecedentes, la pregunta problema, los objetivos planteados. En el capítulo 2 se presenta: un estudio teórico a cerca de los temas que tienen que ver con los *estados ligados y pozo de potencial*, además se evidencia la problemática desde el formalismo matemático.

En el capítulo 3 se presenta: una descripción del programa, la configuración general de este y el método numérico usado.

En el capítulo 4 se presenta: la evaluación de la funcionalidad del programa, implementación con varias configuraciones y comparación con los datos entregados en soluciones analíticas. Además resultados interpretación y posibilidades de la herramienta lograda.

Conclusiones.

5. Metodología

Se trata de una investigación básica: la cual busca revisar y aportar al estudio de una idea ya establecida.

La primera etapa. Observación y reflexión, está basada en la investigación y estudio de las fuentes, sus alcances y formas de abordar los estados ligados. Además la investigación y alcance de los métodos numéricos y el lenguaje de programación a usar. La segunda etapa es el desarrollo de la herramienta computacional basados las observaciones hechas en la primera etapa.

El plan de acción. Con base en lo investigado plantear la forma de llegar a una solución respecto de los objetivos planteados.

6. Conclusiones

- Se logró como primer objetivo hacer un acercamiento al concepto de energía cuantizada introduciendo la ecuación de Schrödinger y pozos de potencial que hablan de los sistemas donde es posible este fenómeno.
- Se logró hacer el análisis de dos de los potenciales más importantes al momento de introducir el tema en los cursos de Mecánica Cuántica. La importancia de estos en la enseñanza radica en que aún poseen soluciones analíticas que ayudan a dar un contexto a la interpretación de la ecuación de Schrödinger en lo que tiene que ver principalmente con estados ligados y la energía cuantizada.
- Gracias a este estudio se verificó el alcance que las fuentes teóricas citadas le dieron al tema, las cuales, no obstante, sólo abordaron parte de las soluciones de los pozos de potencial unidimensional cuadrado y armónico, restringiendo para el estudiante la posibilidad de corroborar las soluciones que entregan la infinidad de configuraciones potenciales unidimensionales.
- Con lo anterior se pudo, además, mostrar la necesidad de la comprensión y uso de métodos numéricos o gráficos cuando no se puede obtener soluciones analíticas. Junto con dichos métodos se pudo ver la efectividad de una herramienta computacional en el manejo de una gran cantidad de datos y la conveniencia de adoptarlos en el estudio de la Mecánica Cuántica.
- Al implementar la herramienta los porcentajes de error entre las soluciones, producto de las ecuaciones y métodos gráficos y las soluciones arrojadas por el programa fueron lo suficientemente bajos, por tanto dicha herramienta es efectiva al calcular cualquier tipo de potencial unidimensional, en particular para las que no tengan solución analítica.

Elaborado por: Eduardo Andrés Muñoz Reina

Revisado por: Néstor Méndez Hincapié

**Fecha de elaboración del
Resumen:**

10

6

2016

Tabla de Contenidos

INTRODUCCION.....	1
CAPITULO 1	
CONTEXTUALIZACIÓN.....	3
1.1. Problemática.....	3
1.2. Objetivo general.....	5
1.2.1 Objetivos específicos.....	5
1.3. Antecedentes.....	5
CAPITULO 2	
CONCEPTOS TEÓRICOS.....	8
2.1. Sistema Cuántico.....	9
2.2. Cuantización.....	10
2.3. Ecuación de Schrödinger.....	13
2.3.1. Caracterización y descripción de la ecuación.....	14
2.3.1.1. Estado no ligado (de colisión).....	16
2.4. Pozo de potencial.....	17
2.4.1. Pozo infinito.....	18
2.4.2. Pozo finito cuadrado.....	20
2.5. Estados ligados.....	25
2.6. Oscilador armónico cuántico.....	27
CAPITULO 3	
DESCRIPCIÓN DEL PROGRAMA.....	29
Introducción.....	29
3.1. Elementos a tener en cuenta.....	30
3.1.1. Método de Numerov.....	30
3.2. El programa.....	32
CAPITULO 4	
IMPLEMENTACIÓN DEL PROGRAMA.....	36
Introducción.....	28
4.1. Ingreso y salida de datos.....	36
4.1.1. pozo cuadrado implementación.....	37
4.1.2. Oscilador armónico implementación.....	42
4.2. resultados y proyecciones del programa.....	44
Conclusiones.....	48
Bibliografía.....	50
APÉNDICE	
A. Oscilador armónico cuántico (desarrollo).....	51
B. Método de Numerov (desarrollo).....	58
C. Tablas comparativas de valores propios y su porcentaje de error.....	61

Tabla de imágenes

CAPITULO 2

Figura 2.1. Pozo de potencial infinito.....	18
Figura 2.2. Pozo de potencial Finito.....	21
Figura 2.3. Grafica de las funciones (2.18a) y (2.18b).....	25

CAPITULO 3

Figura 3.1. ilustración de como el método encuentra la energía correcta.....	32
Figura 3.2. Líneas donde se aprecian los archivos de datos para cada función calculada.....	30
Figura 3.3. Ejemplo de grafica generada por el programa (O. Armónico).....	35

CAPITULO 4

Figura 4.1. línea del programa que describe el potencial pozo cuadrado.....	38
Figura 4.2. línea del programa que describe el potencial armónico	43
Figura 4.3. Pozo de potencial cuadrado. La figura indica el cuarto estado ligado.	46
Figura 4.4. Pozo de potencial de Morse. La figura indica el tercer estado ligado.....	46
Figura 4.5. Pozo de potencial triangular. La figura indica el cuarto estado ligado.....	47
Figura 4.6. Pozo de potencial barrera. La figura indica el tercer estado ligado.....	47

APENDICE A

Figura 1.A. imagen del potencial oscilador armónico, ejemplo clásico.....	51
---	----

Introducción

Una de nuestras labores como docentes en formación es buscar mecanismos que enriquezcan el catálogo de posibilidades para presentar con mayor efectividad todos los temas referentes a la Física, especialmente aquellos que por su elevado manejo conceptual y matemático necesitan de un nivel de abstracción superior, y que por ello escapan al uso de ideas intuitivas o verificaciones experimentales que se puedan llevar al aula.

Como sabemos, la Mecánica Cuántica no sólo presenta la dificultad de estudiar sistemas imperceptibles de forma directa, sino que además, nos habla de comportamientos que no tienen equivalentes clásicos, los cuales son descritos como “*onda partícula*” o “*la cuantización de la energía*” y que a partir de estos han surgido nuevas ideas como la que nos ocupa en este estudio.

El concepto de *Estado Ligado* surge del acercamiento inicial al comportamiento de las partículas en presencia y bajo la influencia de una energía potencial que restringe las posibilidades de movimiento. Esto, es descrito por la ecuación de Schrödinger, que da cuenta de la energía del sistema con la cual podemos hablar del estado del mismo.

Como veremos, este estudio busca una aproximación al concepto primordial de la Mecánica Cuántica, (la cuantización de la energía) y los modelos geométricos, matemáticos usados para aproximarnos cada vez más a lo que podría ser la configuración real de tales sistemas y la implicación que tiene sobre los estados ligados. Se quiere mostrar además la importancia del uso de la programación como parte de la capacitación en Ciencias, particularmente en Mecánica Cuántica para la comprensión de dichos sistemas, el manejo de operaciones en algunos casos complejas y datos útiles en las representaciones gráficas

que ayudan a su descripción. Por tal motivo, se organizó las temáticas de la presente investigación en el siguiente orden:

- La descripción del problema, los antecedentes encontrados sobre este y los objetivos planteados.
- El estudio teórico de los objetos usados en la descripción de los estados ligados.
- La descripción de la herramienta desarrollada, sus posibilidades y datos entregados.
- La evaluación de la funcionalidad del programa y la comparación de datos con los encontrados en el estudio teórico.
- Conclusiones.

CAPÍTULO 1

CONTEXTUALIZACIÓN

1.1 Problemática

Al iniciar la tarea de incorporar nuevas ideas buscando continuar con el estudio de sistemas físicos, ahora a nivel subatómico, es común encontrar conflictos entre lo que sabemos de los sistemas cuando son suficientemente visibles o sensorialmente detectables y lo que se supone pasa cuando estos se salen de nuestra escala y se hacen difíciles de observar, o ser confirmados experimentalmente en el contexto de la investigación, e infinitamente mayor en el de la enseñanza. Para intentar dar cuenta de dichos sistemas sólo se cuenta con el conocimiento teórico y la modelación matemática que nos ofrece alguna información, un tanto a ciegas en términos de la posibilidad de verificar de primera mano; posibilidad que sí nos ofrece la Física Clásica en el aula y en lo cotidiano. Con esta idea, podemos advertir la existencia de una de las dificultades básicas en el estudio de la Física Moderna: la visualización de los sistemas cuánticos.

La necesidad de visualizar es lo que ha llevado a relacionar dichos comportamientos imperceptibles a ideas y conceptos físicos que nos resulten más familiares. El principal ejemplo es el uso de la función de onda para describir un sistema cuántico. Empleando la idea de la naturaleza ondulatoria de la materia, se puede obtener de esta función de onda información como la energía de la partícula o su posición, vinculándolas con la longitud o la amplitud de dicha onda.

Otro elemento importante en la visualización de eventos físicos es la utilización de graficas de funciones que son también familiares gracias a su uso en la descripción de sistemas clásicos y, que de alguna manera, pueden ser extrapolados a situaciones cuánticas en busca de información que nos dé una idea de la forma y su posible evolución.

Estas herramientas de visualización se presentan como un gran potencial técnico y didáctico en la enseñanza, que deben ser usadas, así mismo, con herramientas tecnológicas que faciliten su manejo y lo lleven a un nivel menos abstracto.

Una de las consecuencias de la falta de visualización del fenómeno, es la poca interiorización que se puede hacer y la constante inseguridad al enfrentarse a diversos problemas que involucre la identificación de diversos estados. También, la incapacidad de generar nuevas ideas o posibilidades de investigaciones, pues no existiría un punto claro de partida.

Para el docente en formación, y en el contexto social donde se interviene, se ha querido impulsar la idea de la importancia de la Ciencia como la forma más efectiva de adquirir la capacidad de desarrollar las posibilidades de una comunidad con total autonomía. Esto se logra aterrizando la Física cada vez más con métodos atractivos y digeribles, tales como el uso de las tecnologías de la información y la comunicación (TICS) y los métodos computacionales, los cuales fueron usados en esta propuesta.

En general, este estudio busca beneficiar a estudiantes con necesidad de reajustar o reafirmar el concepto de *estado ligado* y su relación con sistemas cuánticos y energía, ofreciéndoles una herramienta con la que puedan verificar de forma práctica, información que dé cuenta del comportamiento de dichos sistemas.

Teniendo en cuenta lo anterior, se planteó la pregunta:

¿Cómo la evaluación y cálculo de los estados ligados en un sistema Mecánico Cuántico permiten introducir y dar cuenta de la idea de *cuantización de la energía*?

1.2 Objetivo general

Hacer un aporte al estudio del concepto *cuantización de la energía* por medio de la evaluación y cálculo de los estados ligados en un sistema Mecánico Cuántico, con el diseño y programación de una herramienta computacional que dé cuenta del fenómeno y de esta manera contribuir a la visualización y comprensión del tema.

1.2.1 Objetivos específicos

- Caracterizar la idea de estados ligados desde la visión conceptual y matemática.
- Desarrollar y programar la herramienta que dará cuenta del fenómeno estudiado (los estados ligados).
- Evaluar la funcionalidad del programa en la obtención de datos y gráficas.

1.3 Antecedentes

1. COMBINACIÓN DE ESTRATEGIAS DIDÁCTICAS E INTEGRACIÓN DE TIC'S EN LA ENSEÑANZA DE FUNDAMENTOS DE FÍSICA CUÁNTICA PARA INGENIEROS.

Susana Marchisio, Miguel Plano, Jorge Ronco y Oscar Von Pamel

Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura – Univ. Nacional de Rosario –

Se trata de un artículo investigativo, en el cual se diseñó una herramienta de simulación para introducir los conceptos básicos de las ideas cuánticas. La simulación está hecha en

Visual Basic y hace la representación del modelo atómico de Bohr. La herramienta, tiene elementos como video, imágenes fijas, sonido y texto, acompañado además, de una guía de trabajo, y un análisis anterior y posterior a la experiencia. De este trabajo se tomaron los análisis hechos por los investigadores acerca de la forma con que fue recibida la herramienta por los estudiantes y la forma de implementarla; este trabajo sin embargo, hace referencia a un tema básico donde no están incluidos los modelos matemáticos ni el análisis de las gráficas y sus variables. A diferencia de esta investigación, este trabajo contempló un estudio y análisis detallado del comportamiento observado.

2. REPRESENTACIONES GRAFICAS DE LA RELACION: PARTICULA CUANTICA- PAQUETE DE ONDAS.

John Fredy Vera Forero. Universidad pedagógica nacional 2010.

(Mecánica ondulatoria y el caso especial de una partícula cuántica libre) (Papel de las representaciones graficas en la construcción de conceptos científicos. Conceptos cuánticos). Se tomó de este trabajo el análisis que hacen del caso de una partícula libre, pues sirvió de contraste en el estudio de estados ligados. También fue interesante el análisis por medio de gráficas que se hizo, y la idea de la relevancia de la visualización, parte importante en este trabajo.

3. UNA APROXIMACION A UN POZO DE POTANCIAL REAL (UN APORTE A LA ENSEÑANZA DE LA MECANICA CUANTICA).

El trabajo hace un estudio de los estados cuánticos y su energía, enfocándose en el análisis de los pozos de potencial, haciendo énfasis, en la idea de la importancia de acercarse a modelos más reales que den cuenta del sistema de manera más fiel, esto también con la idea de ayudar a la visualización del problema de la partícula confinada.

Fue importante tomar este trabajo como referente, pues se hizo uso de las mismas ideas relacionadas con la del estudio y visualización de sistemas cuánticos por medio de los pozos de potencial. En esta propuesta, además de esto, se mostró la manera de introducir un método computacional para ayudar a esa visualización y aportar un poco más que los modelos matemáticos y sus representaciones gráficas.

CAPÍTULO 2

CONCEPTOS TEÓRICOS

Un aspecto fundamental al iniciar el estudio de los estados cuánticos ligados, teniendo en cuenta las dificultades interpretativas de la física en la que se encuentra enmarcado, es la contextualización de conceptos y términos sobre los cuales se ha construido su teoría y que han posibilitado la asociación de hechos experimentales con determinados modelos matemáticos. Es conveniente entender este tipo de asociaciones y su formalización pues el estado ligado representa quizá una de las ideas más importantes de los sistemas en Mecánica Cuántica, ya que al hablar de estos implícitamente hablamos de cuantización de la energía que como sabemos es la columna que sostiene conceptualmente a esta mecánica. Es importante entonces como primera medida, comenzar nuestro estudio con una breve introducción al formalismo de la Mecánica Cuántica haciendo énfasis en aquellas nociones de ese tipo de *sistemas* que nos compete directamente con el tema, combinación lineal de estados estacionarios y estado no ligado será objeto de estudio. En segundo lugar las representaciones encontradas como ayuda a la visualización del sistema, pozo cuántico, pozo de potencial cuadrado, armónico y sus soluciones por medio de la ecuación de Schrödinger la cual será descrita en detalle pues a partir de este análisis se entenderá la base del problema y la posible solución por el método numérico y el lenguaje de programación (C++) elegido en la construcción de la herramienta que se quiere aportar con este trabajo. En los capítulos 2 y 3 mostraremos esto último haciendo las pruebas necesarias y analizando los alcances del mismo para ver cumplido el objetivo.

2.1 Sistema cuántico

Como se dijo anteriormente la asociación entre el fenómeno físico y el modelo matemático que dé cuenta de este, tiene que ver con la caracterización de un sistema físico, el cual en general debe cumplir las siguientes condiciones:

- Una ubicación en el espacio-tiempo
- Un estado definido que evolucione en el tiempo
- La posibilidad de asociarlo a una energía medible.

En Mecánica Clásica la comprobación de estas condiciones nos da la posibilidad de asignarle una posición y un momento definido al objeto en particular (x, y, z, p_x, p_y, p_z) y con esto, la descripción de la energía cinética y potencial asociada a la partícula $E = K + V = (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)/2m + V(x, y, z)$. la evolución de esta se podrá indicar dentro del espacio de fases representada en una gráfica de p_x vs x para el caso en una sola coordenada. En Mecánica Cuántica el sistema al que se hace referencia puede ser una o varias partículas de orden atómico, por ejemplo un electrón. Para este tipo de sistemas existen además otras condiciones que se deben cumplir por ejemplo, el principio de incertidumbre de Heisenberg el cual imposibilita conocer la trayectoria del punto representativo en el espacio de fase al no poderse saber simultáneamente los valores p_x y x de la partícula. Por esta razón, la localización del punto representativo, deberá hacerse pensando no en un punto si no en una región entre $x, x + \Delta x$ y $p_x, p_x + \Delta p_x$ donde $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$. Siendo $\hbar$ la constante de Planck la cual define el mínimo de acción y en

nuestro caso el mínimo de la región donde se puede encontrar el punto representativo en el espacio de fase.

En la segunda de las condiciones citadas anteriormente se nombra el concepto de *estado* y su evolución en el tiempo, el cual solo puede ser posible teniendo como referencia variables medibles que den cuenta de esa evolución temporal. En Mecánica Cuántica el estado es descrito por un objeto matemático denominado **ket**, las variables a medir se les denomina **observables** que al no ser realmente observables en el mismo sentido que la Mecánica Clásica se analizan asociándolos a conceptos abstractos como operadores (observables) y funciones propias (kets).

El observable, matemáticamente es representado por un operador $\hat{O}$ el cual representara la posición, la cantidad de movimiento, o la energía que dependiendo de su configuración actuara sobre una función transformándola, además, el operador debe satisfacer la ecuación de valores propios.

$$\hat{O}\Psi = \alpha\Psi \quad (2-1)$$

Donde Ψ representa la función propia (ket), y α representa el valor propio. En general existe un conjunto de valores diferentes de $\alpha = \{\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n, \dots\}$ que representan los posibles valores de la medición del observable $\hat{O}$.

2.2 Cuantización.

Para complementar la idea de sistema cuántico se debe hablar de lo que resulta particular en algunos de estos estados físicos y que de hecho da el nombre a esta Física.

Sin hacer referencia a los experimentos y fenómenos que dieron cuenta de la cuantización de la energía, es importante hablar de la idea de átomo que estas observaciones fueron gestando y que tuvo a partir de la inestabilidad teórica del átomo modelado por Rutherford una visión nueva del comportamiento mecánico a ese nivel. Bohr, en su búsqueda de una explicación a dicha inestabilidad expresa en su primer postulado que la fuerza coulombiana debe ser igual a la fuerza centrípeta y que los electrones deben describir su trayectoria sin radiar energía, además que la energía de las orbitas está en función del radio de esta. Con estas ideas podemos obtener la siguiente expresión (*Garcia- Ewert. 2003*).

$$E = K + V = \frac{1}{2}m_e v^2 - k \frac{Ze^2}{r} = - \frac{kZe^2}{2r} \quad (2-2)$$

Donde k es la constante de Coulomb Z el número atómico m_e la masa del electrón v la velocidad y r el radio de la órbita. A demás en esta relación matemática podemos ver involucradas la energía cinética y la potencial que indica la presencia del núcleo. Sin embargo, es en el segundo postulado donde Bohr introduce por primera vez la idea de cuantización cuando condiciona el momento angular y por lo tanto la órbita posible del electrón a ser múltiplo entero de $\frac{h}{2\pi}$ Lo cual queda expresado.

$$L = m_e v r = n \frac{h}{2\pi} \quad (2-3)$$

Con $n= 1, 2, 3 \dots$

Con esta nueva condición, el radio de las orbitas quedaría expresado.

$$r_n = \frac{n^2 (\frac{h}{2\pi})^2}{k m_e e^2} \quad (2-4)$$

Con lo que también remplazando este radio en (2-2) cambia la expresión para la energía.

$$E_n = - \frac{m_e k^2 Z^2 e^4}{n^2 (h/2\pi)^2} \frac{1}{2} \quad (2-5)$$

Con esta expresión ya era posible hacer un análisis del átomo de hidrogeno obteniendo su estado fundamental el cual habla de su nivel más bajo de energía, y a partir de ahí buscar las demás energías ligadas a ese sistema. Con esto ya expuesto, podemos señalar dos ideas de cuantización. La primera que infirió Planck (cuantización de la acción) como parte de la solución al problema de la radiación del cuerpo negro, y una segunda, la de Bohr que habla de la cuantización del impulso angular orbital del electrón que conduce a una cuantización de su energía total.

Hasta aquí, la Mecánica Cuántica fue capaz de responder cuestiones a cerca de la capacidad calorífica de los sólidos a baja temperatura y al comportamiento del átomo de hidrogeno. Sin embargo la teoría falla al tratar con átomos de más de un electrón y el modelo matemático (2-5) no respondería a cuestiones conceptuales como el principio de incertidumbre o la dualidad onda partícula (Eisberg- Resnick. 2009). Esto llevo a la necesidad de idear modelos que integraran lo que se había logrado describir hasta el momento y los nuevos conceptos producto de recientes evidencias.

2.3 Ecuación de Schrödinger

Resultado de las observaciones hechas a inicios del siglo 20 sobre el comportamiento de la luz, se acabó por aceptar su aparente dualidad, la cual dependiendo el fenómeno sobre el cual se estudiaba, esta se manifestaría como partícula o como una onda electromagnética. La generalización de esta idea se tuvo gracias a Louis de Broglie quien propuso la asignación de una onda a cada partícula (ondas de materia) lo cual quedo indicado en la siguiente relación.

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (2-6)$$

Donde p es el momento lineal de una partícula, λ la longitud de onda de la onda asociada y h la constante de Planck. Esto se puede asociar a cualquier partícula como un electrón libre $E = h\nu$ con energía E y frecuencia ν . La comprobación del planteamiento de de Broglie llevó a desarrollar la idea de generar un procedimiento que incorporara el comportamiento ondulatorio de las partículas y encontrara elementos que de forma general describiera la evolución de estos sistemas. Dicho procedimiento fue desarrollado en el trabajo de Erwin Schrödinger sobre mecánica ondulatoria la cual se fundamenta en el postulado de de Broglie y cuyo resultado fue la deducción de la ecuación que lleva su apellido. Esta, ecuación de Schrödinger, no solo habla del comportamiento de partículas a nivel atómico sino que además incluye a la teoría mecánica de Newton como un caso especial.

La teoría fenomenológica que llevo a la deducción de la ecuación está basada en las siguientes consideraciones: (Wichmann, 1996)

1. Son ignorados los fenómenos de creación y destrucción de partículas, lo que lleva a que el número de partículas se conserva en el tiempo.
2. Las velocidades que intervienen son suficientemente pequeñas, por lo que la descripción de la ecuación es no-relativista.

A pesar de que existe una versión relativista para la ecuación, en este trabajo al tratarse de una aproximación a la solución y descripción para un caso particular de esta, solo se trabajara la no-relativista e independiente del tiempo.

2.3.1. Caracterización y descripción de la ecuación.

Regresando a la idea de sistemas cuánticos, uno de los que se debe hablar en principio es el de una partícula libre para la cual la cantidad de movimiento es constante y su energía solamente cinética, según el postulado de De Broglie (2-6) si el momento es constante su longitud de onda también, lo cual quedaría representado por siguiente función:

$$\Psi(\vec{r}, t) = B e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} \quad (2-7)$$

Donde B es la amplitud de onda, y $\vec{k}$ el vector de onda en dirección de la propagación el cual tiene la forma $k = 2\pi/\lambda$. Como sabemos que $\hbar = h/2\pi$ y junto con (2.6) podemos deducir:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{h/p} = p \frac{2\pi}{h} = \frac{p}{\hbar} \quad (2-8)$$

Donde p es la magnitud del momento lineal. En forma más general.

$$\vec{k} = k_x \hat{i} + k_y \hat{j} + k_z \hat{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$$

Para evaluar la variación de la función (2-7) le aplicamos el operador gradiente $\vec{\nabla}f$.

$$\begin{aligned}\vec{\nabla}\Psi(\vec{r}) &= \frac{\partial\Psi(\vec{r})}{\partial x}\hat{i} + \frac{\partial\Psi(\vec{r})}{\partial y}\hat{j} + \frac{\partial\Psi(\vec{r})}{\partial z}\hat{k} = i(k_x\hat{i} + k_y\hat{j} + k_z\hat{k})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \\ \vec{\nabla}\Psi(\vec{r}) &= i\vec{k}\Psi(\vec{r})\end{aligned}\tag{2-9}$$

Con esto se ha verificado que la función de onda Ψ para este caso cumple con la condición definida en la sección 1.1 de ser una función propia del operador gradiente $\vec{\nabla}$ con valor propio $i\vec{k}$. Multiplicamos la relación (2-9) por un factor $-i\hbar$ para descubrir el operador momento:

$$-i\hbar\vec{\nabla}\Psi(\vec{r}) = \vec{p}\Psi(\vec{r})\tag{2-10}$$

Con lo que podemos ver que la cantidad clásica de momento $\vec{p}$ es equivalente en Física Cuántica al operador $-i\hbar\vec{\nabla}$. Si se aplica el operador gradiente nuevamente y se divide por $2m$ lo que es equivalente a una segunda derivada la relación (2-9) queda:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{r}) = \frac{p^2}{2m}\Psi(\vec{r})\tag{2-11}$$

Como $p^2/2m$ es la expresión para la energía cinética E_K la relación matemática finalmente mostraría:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}) = E_K \Psi(\vec{r}) \quad (2-12)$$

La expresión (2-12) describe el comportamiento de una partícula libre, en la cual su energía total es solamente cinética E_K y es expresada por el operador mecano cuántico $(-\hbar^2/2m) \nabla^2$.

2.3.1.1. Estado no ligado (de colisión).

La relación matemática (2-12) es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para la *partícula libre* en la cual aún no existe la influencia de una energía potencial $V(x)$. A las partículas en estas condiciones se dice que están en estado de colisión, las cuales tienen un momento definido y son representados por una onda plana. También en contraste con las que describen los estados ligados, Las funciones que describen los estados de colisión son no normalizables, por lo tanto la amplitud de probabilidad (de la que se hablara más adelante) no se anula o decae. Estos estados representan a partículas que se mueven en un espacio infinito, por lo tanto su función teóricamente nunca tendería a cero, ejemplo de esto puede ser el estado de un electrón desprendido de un átomo al ionizarse. El estado de colisión tiene un tratamiento matemático diferente que no será objeto de estudio en este trabajo y que solo se ha nombrado para poder contrastar algunas de sus características con la de los estados ligados.

2.4 Pozo de potencial

Una vez revisada la forma de la ecuación de Schrödinger y su representación para el caso de una partícula libre, continuaremos su estudio para el caso cuando el sistema a describir incluye una energía potencial $V(x)$ la cual puede estar dada por una fuerza de Coulomb en la interacción de dos partículas o continuando con el ejemplo del electrón, cuando este está bajo la influencia del núcleo de un átomo. Para esto solo bastaría con incluir estas condiciones en la ecuación e intentar buscar la relación de los resultados con el sistema. Sin embargo, existen formas de representar dichos sistemas de forma gráfica, que pueden dar mayor claridad a la hora de interpretarlos.

El pozo de potencial, es un concepto, en el que se busca ilustrar las características de sistemas donde una partícula se encuentra “encerrada” por un potencial el cual varía según ciertos parámetros. El caso más sencillo de trabajar por sus características geométricas el pozo cuadrado con potencial infinito, figura 2.1, en el cual la partícula no tiene posibilidad de salir por lo tanto todos los posibles estados de la partícula están ligados. Una breve descripción de este modelo nos dará una idea de sus características.

La descripción hecha hasta ahora de la ecuación de Schrödinger viene dada para $\vec{r}$ sin embargo, el interés de este trabajo es en los potenciales en una dimensión, por lo tanto en adelante se trabajara con una coordenada en el eje x .

2.4.1 Pozo de potencial infinito.

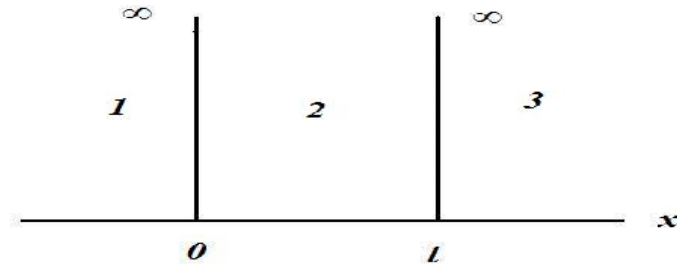


Figura 2.1. Representación gráfica de un pozo de potencial infinito.

Tenemos entonces, las condiciones iniciales representadas de la siguiente forma:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{para } x < 0 \\ 0 & \text{para } 0 \leq x \leq l \\ \infty & \text{para } x > l \end{cases}$$

Donde l es la distancia entre los límites del pozo sobre el eje x . La solución en la región 2 de la ecuación de onda es igual a la de la partícula libre, en las regiones 1 y 3 el potencial siempre será superior a la energía cinética de la partícula por lo tanto no hay posibilidad de encontrarla en esas regiones, con estas condiciones la ecuación de Schrödinger queda descrita:

$$\nabla^2 \Psi(x) + \frac{2mE_K}{\hbar^2} \Psi(x) = 0 \quad (2-13a)$$

La cual es válida solo para la región 2 y donde su energía es solamente cinética. Las soluciones para esta ecuación diferencial (2-13a) está dada por la función (2-13b)

$$\Psi(x) = C\cos(kx) + D\sin(kx) \quad (2-13b)$$

$$\text{Con } D = \sqrt{\frac{2}{l}} \text{ y } k = \sqrt{\frac{2mE_K}{\hbar^2}}$$

Los límites del pozo representan un potencial infinito en $x = 0$ y $x = l$. Por lo tanto la función siempre será cero al acercarse a ellos. Al hacer $\Psi(x = 0) = \Psi(x = l) = 0$ la función de onda queda:

$$\Psi(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } x < 0 \\ D\sin(kx) & \text{para } 0 \leq x \leq l \\ 0 & \text{para } x > l \end{cases}$$

Esto implica, que no todos los valores de longitud de onda $\lambda = 2\pi/k$ son posibles, si no solo aquellos en los que se cumple:

$$kl = \frac{2\pi l}{\lambda} = n\pi \text{ Para todo } n = 1, 2, 3, \dots \quad (2-14)$$

Las soluciones posibles serian:

$$\Psi(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } x < 0 \\ D\sin\left(\frac{nkx}{l}\right) \text{ con } n = 1, 2, 3, \dots & \text{para } 0 \leq x \leq l \\ 0 & \text{para } x > l \end{cases}$$

Los valores de estas energías ligadas se pueden conocer teniendo en cuenta de (2-13b) y (2-14) la siguiente relación:

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{n^2\pi^2}{l^2}$$

Despejando para E y definiendo que sus valores dependen de $n = 1,2,3 \dots$

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ml^2} \quad (2-15)$$

Con esto, se cumple la idea de cuantización de la energía, pues n solo tomaría valores enteros. Podemos concluir entonces como se dijo al inicio de la descripción que en este modelo, todos los posibles estados de la partícula se representarían como estados ligados cuantizados.

2.4.2 Pozo de potencial finito.

En este modelo, la energía potencial que condiciona el movimiento de la partícula, ya no es infinita, lo cual nos dice que esta tiene valores en los cuales podría escapar, y en los que la función de onda sería similar a la que se mostró anteriormente, cuando no existía energía potencial (2-12).

En este caso el modelo es un pozo donde el potencial en las regiones 1 y 3 es V_0 y en la región 2 donde se encuentra la partícula el potencial es cero. El concepto es el mismo que

en el infinito, solo que ahora la energía cinética de la partícula sumergida en el pozo puede superar el valor V_0 y escapar de este.

Las condiciones respecto a la energía potencial se muestran en la figura 2-2 se expresarían:

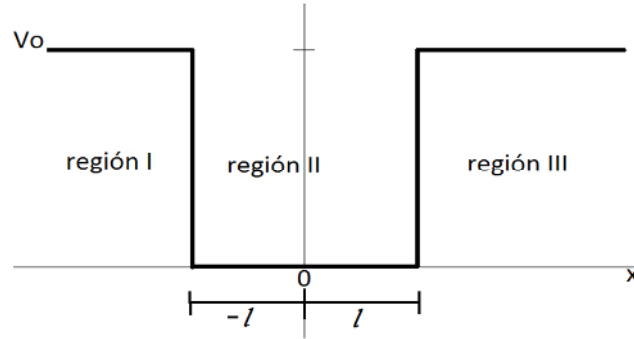


Figura 2.2. Representación gráfica del pozo de potencial finito.

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{desde} & -\infty < x < -l \\ 0 & \text{desde} & -l < x < l \\ V_0 & \text{desde} & l < x < \infty \end{cases}$$

Esta configuración generaría dos casos:

Caso 1: $0 < E < V_0$ en este caso, las soluciones no son totalmente oscilatorias, también se encuentran funciones exponenciales en las regiones 1 y 3, en este caso se puede encontrar estados ligados cuantizados.

Caso 2: $E > V_0$ para este caso, se obtendrían soluciones oscilatorias pero con una longitud de onda diferente y un número de onda k diferente, semejantes a partículas libres, con una energía no cuantizada.

La pregunta que surge en la exposición de estos casos sería. ¿Cuántos estados cuantizados existen en tal modelo?

Parte de la respuesta es, que estaría en función de los valores de V_0 y l .

Del análisis de esta configuración se define la ecuación de Schrödinger para cada región, de la solución de estas ecuaciones diferenciales se obtienen los siguientes resultados.

$$\Psi(x) = \begin{cases} Ae^{\gamma x} & \text{para } -\infty < x < -l \\ C\sin(kx) + D\cos(kx) & \text{para } -l < x < l \\ Fe^{-\gamma x} & \text{para } l < x < \infty \end{cases}$$

$$\text{Donde, } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \text{ y } \gamma = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (2-16)$$

Cada región posee una función que describe el comportamiento de la partícula, sin embargo ese solo dato no es suficiente pues es necesario que estas funciones se articulen formando una sola para tener una descripción coherente del comportamiento de la partícula en todas las regiones. Se precisa de unas condiciones de frontera que nos garantice la continuidad de las funciones en los cortes de cada región. Para esto identificamos las siguientes relaciones.

$$\Psi_1(-l) = \Psi_2(-l)$$

$$\frac{d\Psi_1(-l)}{dx} = \frac{d\Psi_2(-l)}{dx}$$

$$\Psi_2(l) = \Psi_3(l)$$

$$\frac{d\Psi_2(l)}{dx} = \frac{d\Psi_3(l)}{dx}$$

Tenemos entonces que para que se cumpla dicha condición, tanto las funciones como sus derivadas deben ser iguales en su punto de encuentro. Ya que el pozo es simétrico o lo que es lo mismo el potencial es una función par, solo bastara con verificar uno de sus lados para obtener la función correspondiente. Tenemos entonces.

Funciones regiones 2 y 3

$$D\cos(kl) = Fe^{-\gamma l}$$

Y sus derivadas

$$-kD\sin(kl) = -\gamma Fe^{-\gamma l}$$

Dividiendo las ecuaciones se obtiene:

$$k\tan(kl) = \gamma \quad (2-17a)$$

Nos queda (2-17a) para encontrar las soluciones pares. Para encontrar la solución que nos describa las impares usamos la función seno de la región 2 intermedia del pozo y se hace el mismo procedimiento.

Funciones regiones 2 y 3

$$C\sin(kl) = Fe^{-\gamma l}$$

$$kC\cos(kl) = -\gamma Fe^{-\gamma l}$$

$$k\cot(kl) = -\gamma \quad (2-17b)$$

Con las ecuaciones (2-17a y 2-17b) podemos saber cuántas funciones existen dentro del pozo, es decir cuántos estados ligados, encontrando los valores de k y γ , ambas funciones de la energía E (2-16). Como se pueden verificar no tienen solución analítica, son

funciones trascendentes por lo que sus soluciones solo pueden ser encontradas de forma numérica o usando un método grafico como se hará en este caso.

Se reemplaza a continuación para (2-17a y 2-17b) los factores k y γ a sus equivalentes en (2-16) y se grafican en función de E . Los puntos donde se intersequen las funciones serán los valores propios o energías ligadas para una configuración particular.

Como ejemplo tenemos la siguiente configuración para para un caso particular con los siguientes valores de dichos factores y la forma resultante de las funciones a graficar.

$$\text{Con} \quad m = 1$$

$$\hbar = 1$$

$$\sqrt{2E} \tan(\sqrt{2El}) = \sqrt{2(V_0 - E)} \quad (2-18a)$$

$$\sqrt{2E} \cot(\sqrt{2El}) = -\sqrt{2(V_0 - E)} \quad (2-18b)$$

Donde a (2-18a y 2-18b) se les asigno los valores $l = 2$ y $V_0 = 10$ los cuales dieron como resultado la gráfica de la figura 1.3. Se pueden ver las funciones en rojo y en azul respectivamente y en la cual se pueden identificar seis estados ligados representados por las intersecciones y cuyos valores los relacionamos con el eje x . En este caso son:

A 0.25, B 0.99, C 2.23, D 3.93, E 6.06, F 8.51.

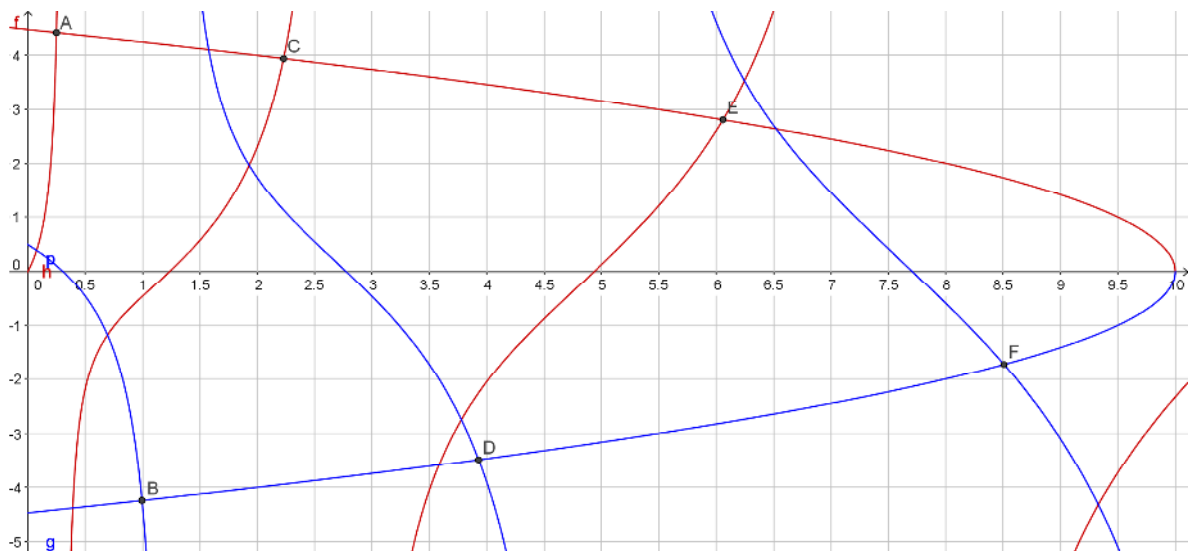


Figura 2.3. Grafica de la función (2.18a) en rojo intersecciones A,C,E. y la función (2.18b) en azul intersecciones B,D,F. para un caso particular.

De esta forma podemos encontrar la cantidad de estados ligados y su número de onda correspondiente haciendo uso de métodos gráficos. La generación de funciones trascendentes tan solo al intentar solucionar este tipo de sistemas aún muy sencillos, es una muestra de la necesidad de implementar métodos numéricos y la ayuda de los ordenadores al momento de encontrarlas y hacerlas visibles para un mejor análisis y comprensión. Este es el espíritu de este trabajo y esa su relevancia en la enseñanza.

2.5 Estados ligados.

En la sección 2.4. Indagamos dos de las principales configuraciones del pozo de potencial cuadrado el cual da cuenta del comportamiento de la función de onda asociada a la partícula sumergida en un potencial. El comportamiento de la onda en el pozo finito es diferente en cada región de este, al punto de convertirse en una función exponencial cuando se traslapa en la región V_0 . La igualdad de las relaciones matemáticas (2-16a y b) muestra el requisito de continuidad entre las dos funciones (regiones 2 y 3) para que sea

válido el posible estado de la partícula aun dentro del pozo. Este comportamiento será, mientras la energía cinética E_K de la partícula no sobrepase el valor de la energía potencial V_0 del sistema. A estos posibles estados se les denomina estados ligados.

Los valores de esos estados, son representados en ecuación de Schrödinger (luego de la transformación con el operador) por los valores propios del vector propio o función de onda, los cuales como vimos en la sección 2.2. Son valores discretos. Cuando la energía potencial no es muy diferente a la cinética de la partícula, las energías propias son pocas y pueden ser calculadas, no en forma analítica, pero si con otros métodos como es el caso del ejemplo expuesto, en el cual, graficamos cada una de las funciones de la igualdad (2.16a y 2.16b), donde γ es representada por las líneas de colores las cuales se intersecan con las líneas asintóticas de las funciones tangente y cotangente. Los puntos de intersección representan los estados ligados en cada potencial. Figura (2.3).

Estos estados ligados tienen diversas formas de ser medidos y dependen en gran medida del tipo de potencial evaluado. Como ejemplo se puede citar el potencial armónico, cuya descripción de sus valores ligados está dada por la relación (2-21). Para este caso, el número de estados ligados y por lo tanto su valor depende solo de la frecuencia de oscilación de la partícula, para el caso del pozo cuadrado finito depende del valor del potencial y el ancho del pozo. Estos aspectos serán evaluados con detenimiento en el capítulo 4.

2.6 Oscilador armónico cuántico.

El oscilador armónico es un caso que será estudiado y evaluado por métodos numéricos en este trabajo, debido a la importancia de esta representación como una aproximación a sistemas más realistas (y por lo tanto más complejos) de tipo oscilatorio en los cursos introductorios a la Mecánica Cuántica. Este en general es la representación de cualquier sistema que ejecute vibraciones pequeñas alrededor de un punto de equilibrio estable, por ejemplo es usado en el estudio de vibraciones de átomos en moléculas diatómicas las cuales se encuentran en las propiedades acústicas, térmicas y magnéticas de los sólidos, además de en electrodinámica de sistemas cuánticos en los cuales las ondas electromagnéticas están vibrando (Eisberg- Resnick, 2001)

La ecuación de Schrödinger que describe este sistema tiene la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{x}) + \frac{1}{2}kx^2\Psi(\vec{x}) = E\Psi(\vec{x}) \quad (2-19)$$

La solución analítica de esta ecuación es bastante larga y la obtención de los estados ligados es más complejo que en el ejemplo anterior, por ahora se mostrara la forma general de la función de onda resultante para el oscilador armónico:

$$\Psi_n(x) = \frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-\alpha^2 x^2 / 2} H_n(\alpha x) \quad (2-20)$$

Donde $\alpha = \sqrt{km / \hbar^2}$ es un parámetro producto del desarrollo de la solución. Su energía o valores propios vienen dados por:

$$E_n = \hbar\omega n + \frac{1}{2}\hbar\omega = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (2-21)$$

Donde ω es la frecuencia angular de oscilación de la partícula. El desarrollo de la solución del oscilador armónico se encuentra en el apéndice A.

A lo largo de este capítulo pudimos ver que elementos conforman la ecuación de Schrödinger y como esta se relaciona con sistemas que describen el comportamiento de una partícula en tres diferentes potenciales unidimensionales a los cuales aún es posible encontrar una solución analítica y con los que pudimos identificar las variables y las funciones resultantes en especial las que dan cuenta de los estados ligados. El estudio de estos potenciales será de utilidad en el trabajo como referencia al verificar la funcionalidad del objeto propuesto, descrito en el siguiente capítulo.

CAPÍTULO 3

DESCRIPCIÓN DEL PROGRAMA

Introducción

En el capítulo 2 se hizo revisión de la parte conceptual física y el análisis de la matemática involucrada en la descripción del sistema que es parte del objeto de nuestro estudio. Al intentar solucionar uno de estos sistemas de forma analítica, específicamente el pozo cuadrado finito generalmente usado como ejemplo base en los cursos introductorios de mecánica cuántica, pudimos ver la dificultad al resolver su ecuación de Schrödinger EDS y encontrar los valores propios que dan cuenta de los estados ligados al pozo. En dicho caso fue necesario para encontrar los estados, hacer uso del análisis de la gráfica que generaba las funciones en cada región del pozo.

Al mostrar también la solución del potencial armónico se vio que los procedimientos para resolver la EDS son variados y dependen del sistema que se quiera analizar, en este caso relacionado directamente con la geometría del potencial la cual produce ecuaciones diferenciales a las que generalmente no es posible encontrar una solución analítica. Se hace necesario entonces hallar una forma de solucionar dicha ecuación para diferentes configuraciones en favor de poder obtener información de cualquier potencial unidimensional propuesto e ilustrar los datos de interés, esto como apoyo en el estudio de los estados ligados. En este capítulo se mostrará entonces como se busca dar solución a esto teniendo en cuenta la descripción del método numérico, el programa y demás elementos usados en este propósito.

3.1. Elementos a tener en cuenta.

Como objetivo tenemos el diseño de una herramienta que sea de ayuda en la solución de la EDS para cualquier potencial unidimensional y la obtención de la información que de ella sale y que es importante en el análisis y comprensión del tema.

Como se habló en el capítulo 1 es necesario en la mayoría de casos implementar un método distinto al analítico, para resolver la ecuación diferencial generada por el sistema, como la solución de esta corresponde a una familia de funciones de onda asociada a los estados cuánticos, debemos encontrar una manera de aproximarnos a la forma de la curva de una hipotética función solución. Con esto tenemos como primer elemento la búsqueda de un método de aproximación apropiado para la forma de la EDS que recordando para nuestro caso, es una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden la cual carece de primera derivada.

El análisis numérico en general provee de un algoritmo para llevar estas operaciones complejas a procedimientos aritméticos que presentan una aproximación numérica. existen métodos que pueden ser usados como por ejemplo el de Runge Kutta de cuarto orden RK4, sin embargo el uso de este requiere operaciones adicionales como la de reducción de orden que recargarían el algoritmo sin ser relevante y si un distractor en el estudio del objetivo propuesto.

3.1.1. Método numérico de Numerov

Un método más directo es el método de Numerov, el cual hace parte de los llamados métodos multipaso y busca resolver ecuaciones diferenciales de orden superior del tipo:

$$y''(x) = f(x)y(x) + w(x)$$

Que como se puede ver tiene las características descritas de la EDS. Para llegar a la forma de este método se debe aproximar la derivada segunda utilizando la fórmula de los tres puntos más su termino de error (Noguera, Rodríguez, Velasco.2010) y así poder obtener la relación de recurrencia mostrada más abajo (3-1) la cual se ve resuelta en términos de la EDS. A continuación se muestra la ecuación y su forma respecto al método. Un desarrollo detallado se hace en el apéndice B.

Se define la ecuación diferencial

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + V(x)\Psi = E\Psi$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E)\Psi$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = f(x)\Psi$$

La cual es introducida en el método:

$$\Psi_n = \frac{\Psi_{n-1} \left(2 - \frac{5h^2 f_{n-1}}{6} \right) - \Psi_{n-2} \left(1 + \frac{h^2 f_{n-2}}{12} \right)}{\left(1 + \frac{h^2 f_n}{12} \right)} + \mathcal{O}(h^6) \quad (3-1)$$

Donde $\Psi_n = \Psi(x_n)$, $f_n = f(x_n) = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x_n) - E)$ y h el paso al siguiente valor de x_n .

Como se puede observar los Ψ_{n-1} y Ψ_{n-2} nos indica que se deben tener en cuenta los dos resultados inmediatamente anteriores para evaluar la función Ψ_n , los términos f_n son funciones de la energía.

El método encuentra los valores por prueba y error por lo tanto son muchas las soluciones arrojadas por este, sin embargo no todas son útiles pues como se vio, las correctas deben cumplir con unas condiciones de frontera. Para integrar se deben asignar puntos de inicio P_i , los cuales están ubicados a izquierda y derecha del pozo, el método integra desde los extremos hacia el centro haciendo valida únicamente la función que logre coincidir el valor de frontera en una curva suave. Figura 3.1.

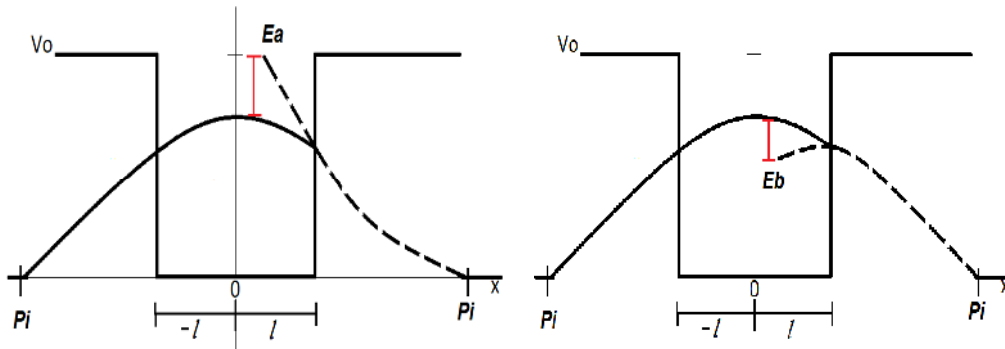


Figura 3.1. Imagen que busca ilustrar la manera como el método encuentra la energía correcta para la condición de frontera para el pozo cuadrado.

1. Se elige un valor para la energía $E_0 = 0 \quad \Psi_E(x)$.
2. Se integra desde los extremos hacia el centro, iterando la función de onda
3. El método no es de un paso, lo que quiere decir que $y(x)$ se calcula a partir de los dos resultados anteriores.
4. Se toma como estimaciones E_a y E_b dentro de los cuales se encuentra la energía correspondiente.
5. Se toma $E = \frac{E_a + E_b}{2}$ Y determina los cambios de signo para la función. Si es menor de cero $E = E_b$, si no $E = E_a$
6. cuando E_b menos E_a es menor que la tolerancia de error se deja.
7. si es mayor se regresa a el punto 5.

Los anteriores pasos muestran algo del procedimiento del algoritmo con el cual se calculan los valores propios de la ecuación.

3.2. El programa.

El método fue programado DevC++ el cual se constituye un puente entre el lenguaje C y el lenguaje de programación orientado a objetos, característica que hace posible la simplificación de acciones y la elaboración de un código más legible [5]. A su vez hace posible el uso de variables y funciones predeterminadas lo que libera al usuario y hace posible centrarse exclusivamente en el algoritmo a programar.

En el programa desarrollado es posible ingresar cualquier tipo de potencial unidimensional del cual calcula los puntos de cada función propia dentro de este en intervalos de $h = 0.05$,

lo cual es un cálculo promedio de 400 puntos por función, además, calcula los valores propios de estas y las normaliza.

Los valores calculados son almacenados en archivos temporales, uno para cada función, estos son relacionados en el programa como lo muestra la figura 3.2.

```
16
17  int main (){
18     ofstream archivo("vpMASA.txt"), potencial("PotencialA.txt"), file("fhiA.txt"),
19     gnuplot("armonico.plt");
```

Figura 3.2. Líneas donde se aprecian los archivos de datos para cada función calculada.

El primero “vpMASA.txt” contiene los datos de los valores propios o energías ligadas. El segundo “potencialA.txt” los de la función potencial, en este caso la del oscilador armónico y el tercero “fhiA.txt” los puntos que conforman cada función propia. Estos datos pueden ser consultados en dichos archivos por el usuario y además, son usados para hacer la representación gráfica de cada una de las funciones y valores mencionados.

La parte visual es hecha en Gnuplot el cual es un programa especializado en la generación de graficas de funciones en 2D y 3D. En este es dibujado el potencial, las funciones de onda y las líneas que representan los niveles de energía. Como lo muestra la figura 3.2.

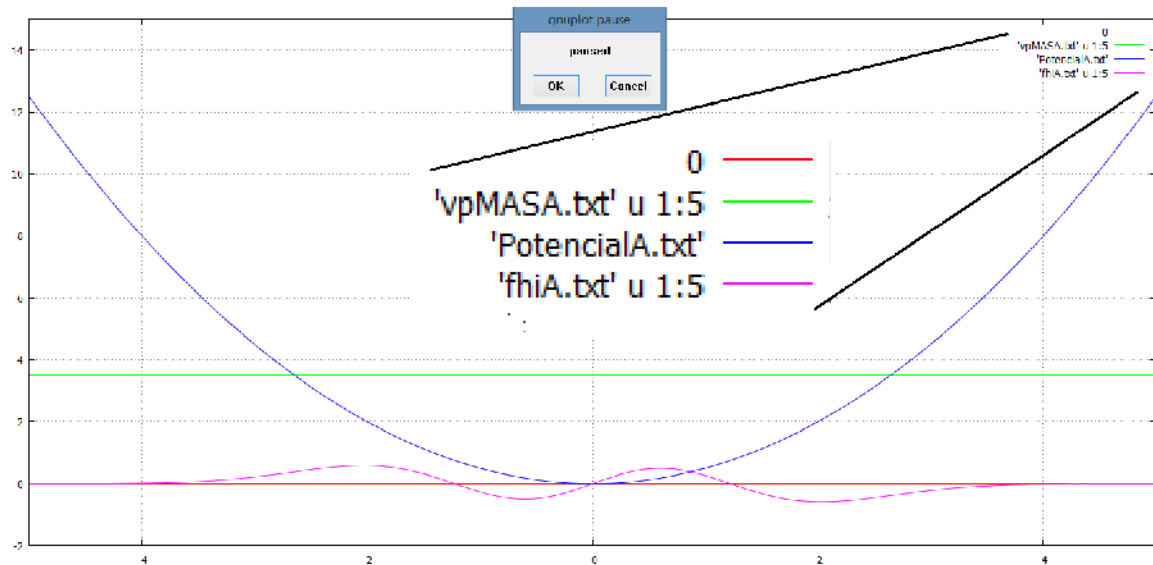


Figura 3.3. Ejemplo de una gráfica entregada por el programa en gnuplot para el Oscilador armónico. Línea azul potencial, rosada función propia, verde energía.

Aquí vemos dibujado el potencial, las funciones de onda y las líneas que representan los niveles de energía. En la parte superior en azul, tenemos un cuadro de comando “gnuplot pause” el cual emerge junto con la gráfica y tiene la función de pausar o hacer avanzar la siguiente imagen al aparecer cada función propia con su nivel de energía.

En el programa en general fueron asignadas líneas para la escritura del potencial unidimensional particular, para procedimientos de iteración del método de numerov y normalización que entregan las funciones y los valores propios correspondientes y líneas para graficas en gnuplot. En el siguiente capítulo se mostrara la manera de ingresar datos, variables y las líneas de código correspondientes.

CAPITULO 4

IMPLEMENTACION DEL PROGRAMA

Introducción

Una vez mostrada la estructura del programa se debe revisar el funcionamiento y la eficacia del mismo, respecto a su capacidad de ingreso, reproducción de datos y visualización de los modelos. Para esto se hará primero la revisión y confrontación de los datos obtenidos de algunas configuraciones del pozo de potencial cuadrado y del oscilador armónico obtenidas con las ecuaciones correspondientes para las energías ligadas (valores propios) y las obtenidas al ingresarlos en el programa. Esto a su vez servirá para establecer el tipo de datos y como se deben ingresar estos para mantener la estabilidad del programa y lograr obtener resultados significativos. Se mostrara además que tipo de interpretación se le pueden dar a los resultados además de las representaciones que de estos hace el programa. Se mostrara el tipo de ayuda que este puede prestar en la comprensión del tema de los estados ligados en potenciales unidimensionales teniendo en cuenta, como se ha dicho, el contexto académico para el cual está hecho.

4.1 Ingreso y salida de datos

En el programa como se dijo, debe ser posible el ingreso de cualquier potencial unidimensional junto con las variables descritas a lo largo del trabajo como son la masa y la frecuencia angular las cuales influyen en la cantidad de estados ligados y los valores tomados por estos. Respecto a los potenciales, sabemos que la geometría de estos ofrece variables que como vimos en el caso del pozo cuadrado finito, el ancho $2l$ en x junto con el

potencial V_0 en y , influyen en la obtención de las funciones solución y sus valores de energía.

Es entonces importante mostrar cómo actúan estas variables en el programa respecto a los resultados arrojados y que precisión es posible lograr. Para esto evaluaremos dos pozos de potencial para los cuales existe solución analítica, lo cual representa la oportunidad de confrontar los datos obtenidos con los hallados en la literatura y poder entregar una estimación de la funcionalidad del programa.

Tenemos a continuación la descripción de las variables, constantes y potenciales que se usaran.

$\hbar$ Cuyo valor es de $1.0546 \times 10^{-34} Js$ representa en términos de cálculos y de escala, un numero difícil de manejar por la cantidad de cifras significativas a tener en cuenta. Debido a esto y por tratarse de un sistema conveniente a el propósito del trabajo, se usara la conversión a unidades atómicas para el ingreso de los valores de $\hbar$, *masa del electron dentro del pozo*.

l . Para el caso del ancho del pozo cuadrado y ω frecuencia angular para el caso del oscilador armónico son usados en el mismo orden de unidad.

4.1.1 Pozo cuadrado implementación.

Como el interés del estudio son los estados ligados o las energías posibles dentro del potencial, evaluaremos primero las energías posibles en el potencial cuadrado usando el método grafico que se obtiene con las relaciones (2-17 a y b) para casos particulares.

En el programa escribimos la línea que hace referencia a la relación matemática que describe el potencial cuadrado. Figura 4.1.

```

13
14 double V(double x){
15
16     if (x <= -2) return 10; if (x > -2 && x < 2) return 0; if (x >= 2) return 10;}
17

```

Figura 4.1. Línea del programa que describe el pozo de potencial cuadrado. Resaltados los valores particulares de l y V_0 respectivamente.

```
double V(double x){ if (x <= -2) return 10; if (x > -2 && x < 2) return 0; if (x >= 2) return 10;}
```

Haciendo uso del programa para la modelación del pozo de potencial cuadrado se verifica los valores de las primeras 6 energías para varias amplitudes l del pozo y un potencial V_0 constante. Los resultados los encontramos en la tabla 3.1a los cuales como se dijo se pueden comparar con los resultados obtenidos del método grafico explicado en la sección 2.4.2. Estos consignados en la tabla 4.1b.

Para $V_0 = 10 = 76,2 \text{ eV}$

Programa

$n_i \backslash l$	0.5	1	2	3	4	5
n_1	2.290	0.8185	0,249	0,1186	0,0691	0,0451
n_2	8.130	3.2170	0,994	0,4740	0,2763	0,1807
n_3		6.9406	2,225	1,0651	0,6214	0,4065
n_4			3,926	1,8894	1,1038	0,7223
n_5			6,055	2,9432	1,7225	1,1280
n_6			8,506	4,2201	2,4764	1,6230

Tabla 4.1a. Valores entregados por el programa (pozo cuadrado) para $V_0 = 10$ y distintas l .

Método grafico

$n_i \backslash l$	0.5	1	2	3	4	5
n_1	2,295	0,819	0,249	0,119	0,069	0,0452
n_2	8,137	3,221	0,994	0,474	0,276	0,1808
n_3		6,945	2,227	1,065	0,621	0,4066
n_4			3,928	1,890	1,104	0,7226
n_5			6,058	2,944	1,723	1,1284
n_6			8,508	4,221	2,477	1,6236

Tabla 4.1b. Valores entregados por el método grafico para $V_0 = 10$ y distintas l .

En las tablas 4.1a y 4.1b podemos ver los resultados de los seis primeros valores propios cuando el potencial es constante $V_0 = 10$ y se varía el ancho del pozo l . La primera usando el programa y la segunda el método gráfico. Al compararlas, podemos observar que para los valores de $l = 0.5, 1$ y 2 hay concordancia en la cantidad de estados ligados obtenidos por el programa y el método, estos son 2, 3 y 6 estados ligados respectivamente. Los valores de estos también nos muestran coherencia, al estar el valor propio más alto cercano al límite impuesto por el potencial V_0 . Los estados ligados para las $l = 3, 4$ y 5 son respectivamente 9, 12 y 15. Sin embargo como se dijo, se consideran solo los seis primeros, los cuales también al comparar las dos tablas muestran valores bastante cercanos. Para verificar el nivel de concordancia de los datos entregados por el programa versus método gráfico, hallamos el error porcentual de algunos de ellos tomando como valor real el entregado por el método gráfico n_g y el del programa como valor medido n_p .

$$\varepsilon_{\%} = \frac{|n_g - n_p|}{n_g} \times 10 \quad (4-1)$$

Se consideró conveniente solo la evaluación de una muestra, en este caso de los valores n_1 y n_5 de $l = 2$. Los cuales presentaron para el n_1 un error de 0% y para el n_5 uno del 0,023%.

La muestra representa una alta correspondencia en los valores evaluados, el resultado se puede fácilmente extrapolar a los demás valores al hacer una comparación por inspección. Esto, además del análisis previo evidencia precisión en los datos entregados por el programa.

En las talas 4.2a y 4.2b se realizó el mismo procedimiento disminuyendo el potencial con la intención de evaluar la precisión con valores más bajos.

Para $V_0 = 5 = 38,1$ eV

Programa

$n_i \backslash l$	0.5	1	2	3	4	5
n_1	1.7528	0.7029	0,22448	0,11205	0,06542	0,04322
n_2	5.0090	2.6862	0,89200	0,44723	0,26142	0,17281
n_3		5.1160	1,98085	1,00222	0,58721	0,38848
n_4			3,43246	1,77027	1,04126	0,68974
n_5			4,95795	2,73774	1,62100	1,07579
n_6				3,87172	2,32306	1,54541

Tabla 4.2a. Valores entregados por el programa (pozo cuadrado) para $V_0 = 5$ y distintas l .

Método gráfico

$n_i \backslash l$	0.5	1	2	3	4	5
n_1	1,7551	0,7036	0,2274	0,1121	0,0662	0,0442
n_2	4,9991	2,6879	0,9158	0,4474	0,2641	0,1744
n_3		4,9979	2,0263	1,0025	0,5941	0,3906
n_4			3,5093	1,7708	1,0535	0,7024
n_5			4,9929	2,7384	1,6399	1,0810
n_6				3,8723	2,3488	1,5552

Tabla 4.2b. Valores entregados por el método gráfico para $V_0 = 5$ y distintas l .

En este caso la correspondencia en el número de estados ligados persiste, sin embargo el error porcentual entre los valores muestra n_1 y n_5 aumenta en $l = 2$. Para $n_1 = 0.142\%$ y para $n_5 = 0.701\%$.

En las tablas 4.3a y 4.3b se muestran los valores al hacer ahora $l = 2$ constante y variar el potencial V_0 . En las tablas 4.4a y 4.4b se hizo el mismo procedimiento para $l = 0.5$.

Para $l = 2 = 2 \times 10^{-10}m$

Programa

$n_i \backslash V_0$	2	4	6	8	12	14
n_1	0,1959	0,2219	0,2349	0,2432	0,2535	0,2570
n_2	0,7652	0,8796	0,9349	0,9694	1,0121	1,0266
n_3	1,6155	1,9412	2,0821	2,1668	2,2690	2,3032
n_4		3,3047	3,6320	3,8088	4,0106	4,0763
n_5			5,4354	5,8302	6,2102	6,3259
n_6				7,9147	8,8068	9,0117

Tabla 4.3a. Valores entregados por el programa para $l = 2$ y distintas V_0 .

Método grafico

$n_i \backslash V_0$	2	4	6	8	12	14
n_1	0,1960	0,2222	0,2351	0,2434	0,2537	0,2573
n_2	0,7654	0,8800	0,9354	0,9701	1,0130	1,0276
n_3	1,6157	1,9419	2,0831	2,1682	2,2709	2,3053
n_4		3,3053	3,6334	3,8108	4,0136	4,0797
n_5			5,4362	5,8322	6,2141	6,3305
n_6				7,9148	8,8107	9,0169

Tabla 4.3b. Valores entregados por el método grafico para $l = 2$ y distintas V_0 .

Para $l = 0.5 = 5 \times 10^{-11}m$

Programa

$n_i \backslash V_0$	2	4	6	8	12	14
n_1	1,0920	1,5828	1,8937	2,1174	2,4292	2,5451
n_2			5,8769	7,1828	8,8637	9,4550

Tabla 4.4a. Valores entregados por el programa para $l = 0,5$ y distintas V_0 .

Método grafico

$n_i \backslash V_0$	2	4	6	8	12	14
n_1	1,0924	1,5844	1,8964	2,1212	2,4353	2,5522
n_2			5,8773	7,1858	8,8740	9,4693

Tabla 4.4b. Valores entregados por el método grafico para $l = 0,5$ y distintas V_0 .

Continúa habiendo correspondencia entre el número de estados ligados dado por el método gráfico y el programa, los valores propios son coherentes respecto al límite impuesto por cada potencial. En la tabla 4.3a Tenemos datos para $l = 2$ y distintos potenciales V_0 , se tomaron como muestra el n_1 y el n_6 de $V_0 = 14$ y se halló su error respecto a sus análogos de la tabla 4.3b. Para $n_1 = 0.116\%$ y $n_6 = 0.057\%$. Para las tablas 4.4a y 4.4b se tomaron los datos n_1 y n_2 de $V_0 = 14$ los cuales entregaron los siguientes resultados. $n_1 = 0.278\%$ y $n_2 = 0.151\%$.

En el apéndice C se muestran los errores porcentuales de todos los valores de las tablas comparativas en el podemos verificar que el dato con el mayor error es de 2.36% lo cual muestra una correspondencia importante entre los datos de control y los obtenidos con el programa.

3.1.2. Oscilador armónico implementación.

Para obtener las energías de los estados ligados en un oscilador armónico cuántico es necesario evaluar la relación matemática (2-21) obtenida de la solución analítica descrita en la sección (2.6).

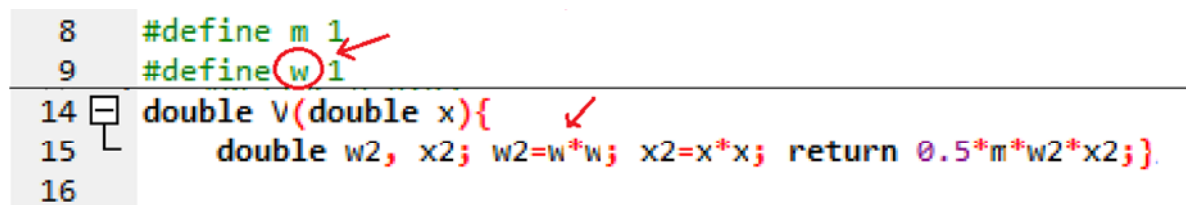
$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

Con la ecuación podemos ver como las energías dependen en este caso únicamente de la frecuencia angular de oscilación de la partícula y del valor entero n .

En el programa, introducimos la descripción matemática del potencial armónico incluida en la EDS (2-19). La relación matemática es el de una función cuadrática en x que representa la posición de la partícula (García, Ewert. 2003).

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (3-2)$$

La masa en este caso también equivale a la unidad, ω puede tomar diferentes valores. La relación (4-2) queda escrita en el programa como lo muestra la figura (4.2)



```
8  #define m 1
9  #define w 1
14 double V(double x){
15     double w2, x2; w2=w*w; x2=x*x; return 0.5*m*w2*x2;}
16 }
```

Figura 4.2. Línea del programa que describe el potencial oscilador armónico. A la frecuencia angular indicadas en rojo, se cambia el valor en la línea 9.

Como ya se dijo, la masa equivale a unidad y para evaluar los resultados obtenidos por el programa hará para diferentes valores de ω y se comparara con los obtenidos con la ecuación (2-21). En las tablas (4.5a) encontramos los seis primeros valores propios obtenidos por el programa para trece valores de ω , en las tablas (4.5b) los valores propios según la ecuación para las mismas frecuencias.

Programa

$n_i \backslash \omega$	0,4	1	2	3	4	5
n_0	0,2	0,5	1	1,5	2	2,5
n_1	0,6	1,5	3	4,5	5,999	7,4999
n_2	1	2,5	5	7,499	9,999	12,499
n_3	1,4	3,5	6,9999	10,5	13,999	17,499
n_4	1,8	4,5	8,9999	13,499	17,999	22,499
n_5	2,2	5,49999	11	16,499	21,999	27,499

Tabla 4.5a. Valores entregados por el programa para distintos valores de ω .

Ecuación

$n_i \backslash \omega$	0,4	1	2	3	4	5
n_0	0,2	0,5	1	1,5	2	2,5
n_1	0,6	1,5	3	4,5	6	7,5
n_2	1	2,5	5	7,5	10	12,5
n_3	1,4	3,5	7	10,5	14	17,5
n_4	1,8	4,5	9	13,5	18	22,5
n_5	2,2	5,5	11	16,5	22	27,5

Tabla 4.5b. Valores entregados por la ecuación para distintos valores de ω .

Los datos de las tablas, muestran en la mayoría de casos una total correspondencia entre los obtenidos por el programa y los obtenidos con la ecuación, el error porcentual más alto es el del valor n_2 de $\omega = 3$ con un 0.013% lo cual sigue mostrando una correlación bastante importante. Los errores porcentuales se encuentran en el apéndice C.

4.2 Resultados y proyecciones del programa.

En la sección 4.1. Pudimos ver el funcionamiento del programa, la forma de usarlo y poder obtener información útil en el estudio de los pozos de potencial unidimensionales, en particular los estados ligados. Vimos que los datos de los valores propios arrojados por el programa, al ser comparados con los obtenidos por otros métodos presentan diferencias porcentuales razonablemente bajas y en algunas nulas, como para poder dar un fallo en favor de la confiabilidad del programa.

Esto marca la realización del objetivo principal de este trabajo y es el de entregar una herramienta confiable que aporte al estudio y visualización de datos de interés, en particular los estados ligados, en pozos de potencial unidimensionales y los sistemas que ellos representan.

Se ha evidenciado a lo largo del trabajo que el estudio de la Mecánica Cuántica requiere en la mayor parte de los casos procesos analíticos complejos donde resulta necesario el uso de métodos numéricos y con esto el manejo de gran cantidad de datos para dar cuenta del comportamiento de un sistema, esto hace que el manejo de estos métodos junto con la habilidad en la programación puedan convenientemente ser integrados a dicho estudio. El interés de este trabajo, ha sido el de hablar de los estados ligados, los cuales tienen directa relación con el concepto de energía cuantizada y que representa tema básico en estos cursos, mostrando el contexto en el que se dan y la manera en que se pueden evidenciar. Resulta conveniente poder tener una herramienta con la cual verificar los resultados de estas energías obtenidas por métodos analíticos y poder evidenciar los potenciales que representan los sistemas que las condicionan junto con la forma que las funciones solución toma de acuerdo a ellos. Esto pudiéndose llevar a otro nivel, donde podemos ver soluciones de sistemas a los cuales no es posible una solución analítica.

A continuación se muestran otros ejemplos de potenciales introducidos en el programa.

La descripción del pozo de la figura 4.3. (Pozo cuadrado) Ya se hizo en la sección 2.4.2. El potencial de Morse figura 4.4 usado para la descripción de sistemas de moléculas diatómicas, resulta ser una mejor aproximación que el oscilador armónico (Eisberg, Resnick, 2009). El pozo de potencial triangular figura 4.5 y el potencial barrera o pozo doble figura 4.6, que puede ser usado en la descripción sistemas de enlaces covalentes uniones de dos átomos. (Téllez, 2010)

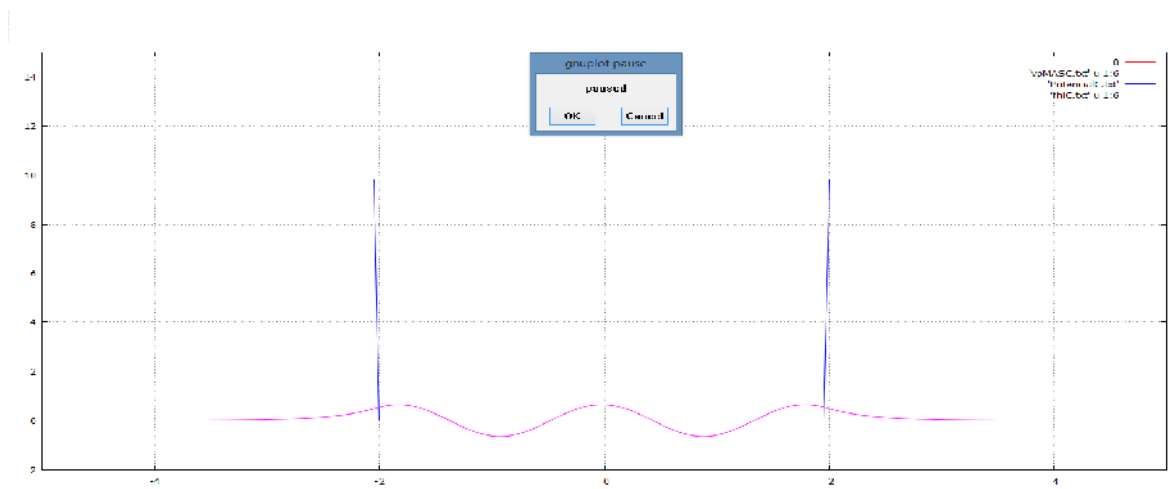


Figura 4.3. Pozo de potencial cuadrado. La figura indica el quinto estado ligado.

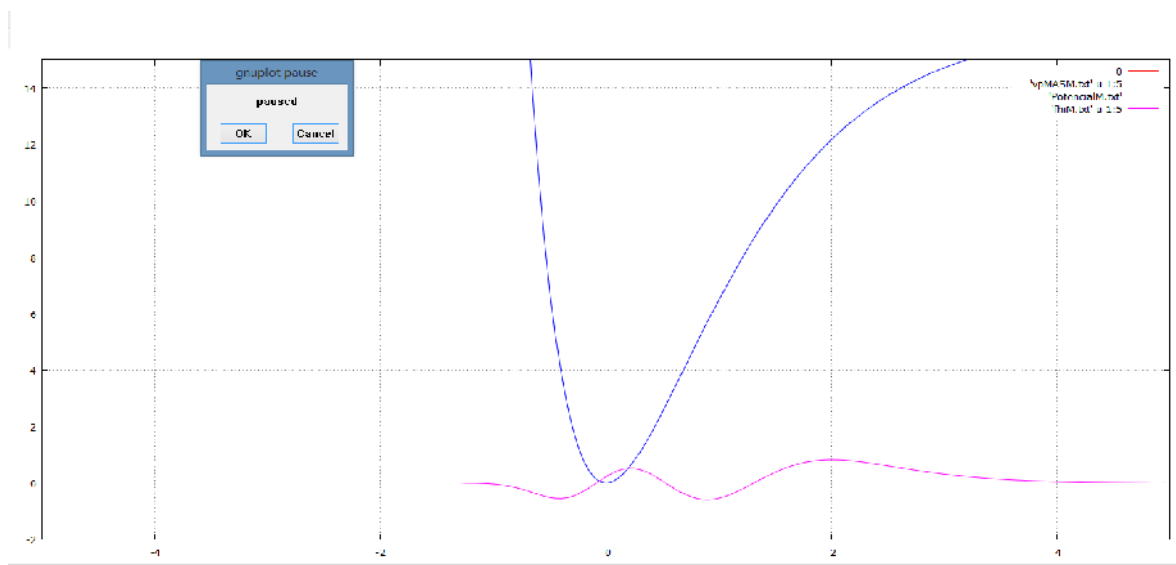


Figura 4.4. Pozo de potencial de Morse. La figura indica el cuarto estado ligado.

Los valores propios para este caso particular de morse son:

2.72982- 7.43944- 11.1491- 13.8587- 15.5683- 16.2936

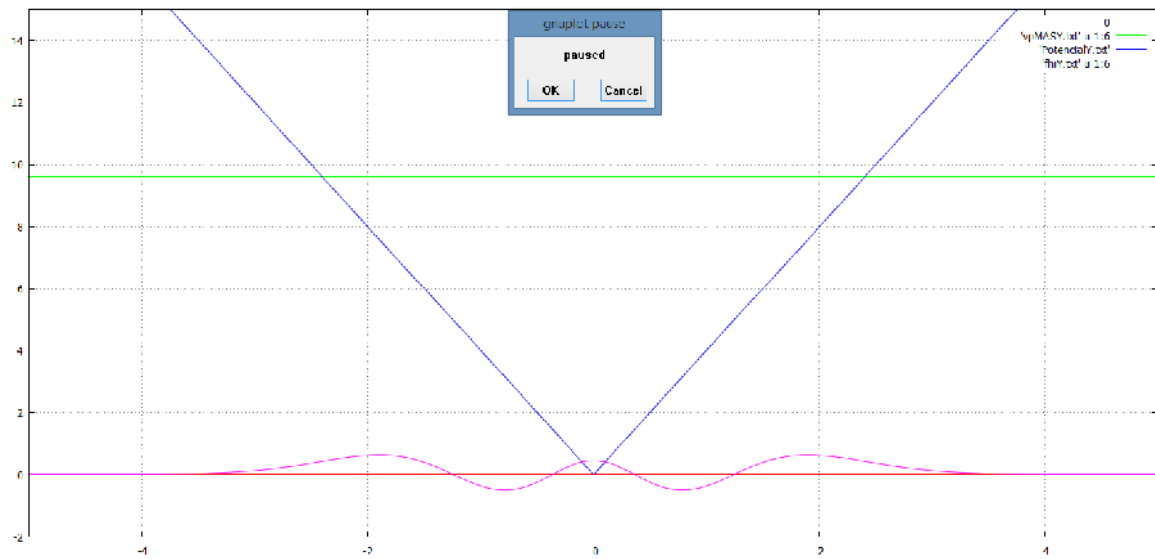


Figura 4.5. Pozo de potencial triangular. La figura indica el quinto estado ligado.

Los valores propios obtenidos para este caso particular pozo triangular son:

2.035- 4.676- 6.495- 8.175- 9.63- 11.04

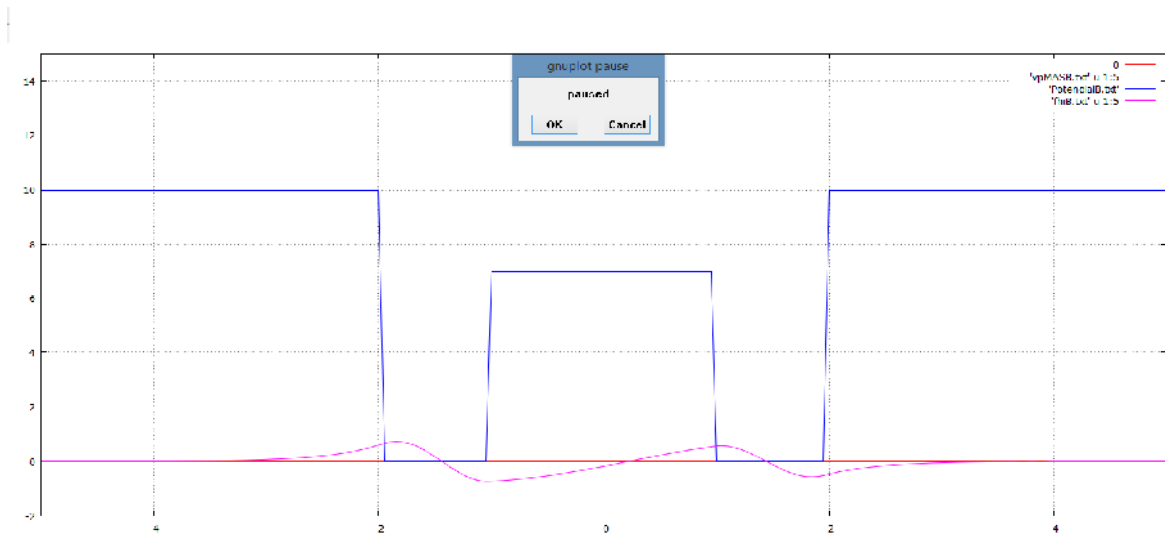


Figura 4.6. Pozo de potencial barrera. La figura indica el cuarto estado ligado al sistema.

Los valores obtenidos para este caso particular, pozo barrera son:

2.14382 -2.28656 -7.04699 -7.61033 9.14308

Conclusiones

Se logró como primer objetivo hacer un acercamiento al concepto de energía cuantizada introduciendo la ecuación de Schrödinger y los objetos (pozos de potencial) que hablan de los sistemas donde es posible este fenómeno.

Se logró hacer el análisis de dos de los potenciales más importantes al momento de introducir el tema en los cursos de Mecánica Cuántica. La importancia de estos en la enseñanza radica en que aún poseen soluciones analíticas que a pesar de su complejidad ayudan a dar un contexto a la interpretación de la ecuación de Schrödinger en lo que tiene que ver principalmente con estados ligados y la energía cuantizada.

Gracias a este estudio se verificó el alcance que las fuentes teóricas citadas le dieron al tema, las cuales, no obstante, sólo abordaron parte de las soluciones de los pozos de potencial unidimensional cuadrado y armónico, restringiendo para el estudiante la posibilidad de corroborar las soluciones que entregan la infinidad de configuraciones potenciales unidimensionales.

Con lo anterior se pudo, además, mostrar la necesidad de la comprensión y uso de métodos numéricos o gráficos cuando no se puede obtener soluciones analíticas. Junto con dichos métodos se pudo ver la efectividad de una herramienta computacional en el manejo de una gran cantidad de datos y la conveniencia de adoptarlos en el estudio de la Mecánica Cuántica.

Al implementar la herramienta los porcentajes de error entre las soluciones, producto de las ecuaciones y métodos gráficos y las soluciones arrojadas por el programa para los dos tipos de potenciales, fueron lo suficientemente bajos como para poder afirmar que dicha

herramienta es efectiva al calcular cualquier tipo de potencial unidimensional, en particular para las que no tengan solución analítica.

Bibliografía

Alonzo. M, Finn. E. J. (1968) **Quantum and Statistical Physics. Vol 3** Addison-Wesley Publishing Company.

Ballentine. Leslie E. (1998) **Quantum Mechanics (A Modern Development)**

Borowitz. S. (1973) **Fundamentos de Mecánica cuántica-** (partículas, Ondas y mecánica de ondas) Editorial Reverté S.A.

Burden. R, Faires. J. (2002) **Análisis numérico séptima edición** international Thomson editores S.A.

Diaz Medina, J.(2007)(**calculo numérico. notas**) Universidad de Valencia recuperado de <http://www.uv.es/~diazj/calnumjd.html> [2]

Eisberg- Resnick. (2009) **Física cuántica** (Átomos, moléculas, sólidos, núcleos partículas) LimusaWiley

Eyvind. H. Wichmann (1996) **Física cuántica. Vol 4** (Berkeley physics course)editorial Reverté s.a

Garcia. M, Ewert. J. (2003) **Introducción a la física moderna tercera edicion-** Unibiblos.

Noguera. F, Rodríguez. V, Velasco. J. (2010) (**Diseño de una arquitectura para la solución de Schrödinger usando el método de numeros**)IBERCHIP foz do Iguazu Brazil.

Téllez. A,**transmisión y reflexión de partículas** /2010/07/ recuperado de http://la-mecanica-cuantica.blogspot.com.co/transmision-y-reflexion-de-particulas_05.html(02/12/2015) [4]

Wolfgang Bauer- Gary D. Westfall (2011) **Física para ingeniería y cienciasvol 2**-editorial Mc Graw Hill.

C ventajas/desventajas noviembre 2006. Recuperado de https://www.americati.com/doc/ventajas_c/ventajas_c.html(02/12/2015)

Apéndice A

Oscilador armónico cuántico (desarrollo)

Tenemos para empezar la descripción matemática de la energía potencial del oscilador armónico simple (4-2) y la ecuación de Schrödinger para este (2-19).

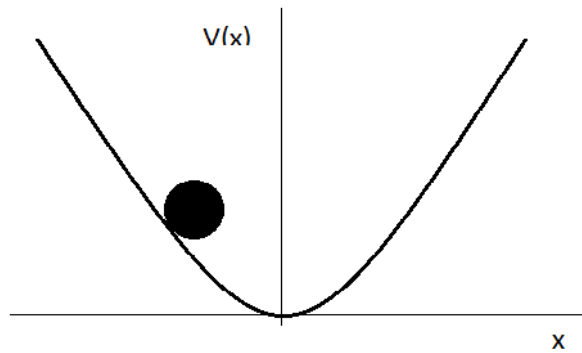


Figura 1.A. imagen del potencial oscilador armónico, con un ejemplo clásico donde la energía potencial es cero en $x=0$.

$$V = \frac{1}{2} k x^2$$

$$\nabla^2 \Psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2} k x^2 \right) \Psi(x) = 0$$

Ponemos k en términos de la frecuencia clásica.

$$k = (2\pi f)^2 m \quad (1.A)$$

$$\nabla^2 \Psi(x) + \left[E \frac{2m}{\hbar^2} - \left(\frac{2\pi f m}{\hbar} \right)^2 x^2 \right] \Psi(x) = 0$$

Introducimos para organizar los parámetros α y β .

$$\alpha = \frac{2\pi f m}{\hbar} \quad , \quad \beta = E \frac{2m}{\hbar^2} \quad (2.A)$$

La ecuación de Schrödinger quedaría:

$$\nabla^2 \Psi(x) + [\beta - \alpha^2 x^2] \Psi(x) = 0$$

Expresamos la ecuación de forma adimensional. Utilizamos las relaciones (1.A) (2.A)

$$u = \sqrt{\alpha} x = \left[\frac{2\pi m}{\hbar^2 \pi} \left(\frac{k}{m} \right)^{1/2} \right]^{1/2} x = \frac{(km)^{1/4}}{\hbar^{1/2}} x$$

Hacemos un cambio a la variable u .

$$\frac{d\Psi}{dx} = \frac{du}{dx} \frac{d\Psi}{du} = \sqrt{\alpha} \frac{d\Psi}{du}$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{d^2\Psi}{dx^2} \left(\frac{du}{dx} \right)^2 + \frac{d\Psi}{du} \frac{d^2u}{dx^2}$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = 0 \left(\frac{du}{dx} \right)^2 + \frac{d^2\Psi}{du^2} \alpha + 0 \frac{d^2u}{dx^2} + \frac{d\Psi}{du} 0 = \alpha \frac{d^2\Psi}{du^2}$$

$$\alpha \frac{d^2\Psi}{du^2} + (\beta - \alpha u^2) = 0$$

$$\frac{d^2\Psi}{du^2} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - u^2 \right) = 0 \quad (3.A)$$

Al ser evaluados los valores para la energía llevados al infinito los factores β/α resultan muy pequeños e insignificantes respecto a u^2 por lo que la relación (3.A) toma la forma:

$$\frac{d^2\Psi}{du^2} = u^2\Psi \quad (4.A)$$

Sabemos que la solución general de esta ecuación es.

$$\Psi = Ae^{-u^2/2} + Be^{u^2/2}$$

Derivamos la función dos veces.

$$\frac{d^2\Psi}{du^2} = Au^2e^{-u^2/2} + Bu^2e^{u^2/2}$$

$$\frac{d^2\Psi}{du^2} = u^2 \left(Ae^{-u^2/2} + Be^{u^2/2} \right) = u^2\Psi$$

Vemos que satisface la ecuación (4.A). Necesitamos que la función sea finita para esto hacemos $B = 0$.

$$\Psi_{\infty}(u) = Ae^{-u^2/2} \quad \text{Para } |u| \rightarrow \infty \quad (5.A)$$

Necesitamos un factor que haga que la función sea viable también para valores pequeños de u . Introducimos el factor $H(u)$ en (5-A).

$$\Psi(u) = \Psi_{\infty}(u)H(u) = Ae^{-u^2/2}H(u)$$

Evalúo $H(u)$ derivando dos veces $\Psi(u)$. El resultado lo sustituyo en la ecuación de Schrödinger lo cual queda: (García. Ewert, 2003)

$$\frac{d^2 H}{du^2} = -2u \frac{dH}{du} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - 1 \right) H = 0 \quad (6.A)$$

Resolvemos la ecuación (6-A) por el método de series de potencias el cual tiene la forma:

$$H(u) = \sum_{s=0}^{\infty} a_s u^s = a_0 + a_1 u + a_2 u^2 + a_3 u^3 \dots$$

Derivamos dos veces y reemplazamos en la ecuación de Hermite (6-A). Los coeficientes a_s de todas las potencias de u deben anularse pues deben ser independientes del valor de u . Separando e igualando a cero cada una.

$$\begin{aligned} u^0 &= 1 \cdot 2a_2 + (\beta/\alpha - 1)a_0 = 0 \\ u^1 &= 2 \cdot 3a_3 + (\beta/\alpha - 1 - 2 \cdot 1)a_1 = 0 \\ u^2 &= 3 \cdot 4a_4 + (\beta/\alpha - 1 - 2 \cdot 2)a_2 = 0 \\ u^3 &= 4 \cdot 5a_5 + (\beta/\alpha - 1 - 2 \cdot 3)a_3 = 0 \end{aligned}$$

En general.

$$u^s = (s + 1)(s + 2)a_{s+2} + (\beta/\alpha - 1 - 2s)a_s = 0$$

Obtenemos con esto la relación de recurrencia (7-A).

$$a_{s+2} = \frac{(2s+1-\beta/\alpha)}{(s+1)(s+2)} a_s \quad (7.A)$$

Los coeficientes con subíndices pares quedan en términos de a_0 . Los coeficientes con subíndices impares en términos de a_1 . La razón que sale de esta serie es de la forma a_{s+2}/a_s . Para s grandes la relación de recurrencia queda:

$$a_{s+2}/a_s = -\frac{(\beta/\alpha - 1 - 2s)}{(s+1)(s+2)} \approx \frac{2s}{s^2} = \frac{2}{s}$$

La razón para la expansión en series de potencias de e^{u^2} con s grandes es igual a:

$$\frac{(s/2)}{(s/2+1)(s/2)} = \frac{1}{s/2+1} \approx \frac{1}{s/2} = \frac{2}{s}$$

Vemos que $H(u)$ se comporta como e^{u^2} cuando u es muy grande. Se puede escribir:

$$\Psi(u) = Ae^{-u^2/2} e^{u^2} = Ae^{u^2/2}$$

Como aun crece sin límite cuando $|u| \rightarrow \infty$, se fuerza valores de β/α en la función para que no crezca sin límite.

$$\beta/\alpha = 2n + 1$$

$$\text{Para } n = 1, 2, 3, \dots \quad \text{si } a_0 = 0$$

$$\text{Para } n = 0, 2, 4, \dots \quad \text{si } a_1 = 0$$

Evaluamos α y β lo que da:

$$\frac{2E}{\hbar f} = 2n + 1$$

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar f \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (8.A)$$

Tomamos la fórmula de Rodríguez para los polinomios de Hermite.

$$H_n(u) = (-1)^n e^{u^2} \frac{d^n}{du^n} e^{-u^2}$$

Se reemplaza para cada n lo cual da:

$$H_0(u) = 1, H_1(u) = 2u, H_2(u) = 4u^2 - 2, \dots$$

Con esto la ecuación de la función de onda para el oscilador armónico cuántico es:

$$\Psi_n(u) = A_n e^{-u^2/2} H_n(u) \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

La constante A_n se obtiene normalizando la ecuación: (Garcia. Ewert, 2003)

$$A_n^2 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} |H_n(u)|^2 du = 2^n n! \pi^{1/2} = 1$$

Esto igualado a 1 da:

$$A_n = \sqrt{\frac{1}{2^n n! \pi^{1/2}}} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

La función de onda normalizada para el OAC en función de x es:

$$\Psi_n(x) = \frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-\alpha x^2/2} H_n(\alpha x)$$

La anterior relación matemática es la encontrada como solución del potencial armónico que se habló en la sección 2.6. Ecuación (2-20). La relación (8.A) es la misma (2-21) que se usó en la obtención de los estados ligados.

Apéndice B

Método Numerov (desarrollo)

Tenemos la serie de Taylor para la función $\Psi(x)$ alrededor de x_0

$$\Psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (x-a)^n \quad \text{con } a_n = \frac{\Psi^{(n)}(a)}{n!} \quad (1.B)$$

para este caso, $(x-a) = h$ y $a = x_0$

con esto entonces $\Psi(x) = \Psi(x_0 + h)$

El polinomio quedaría:

Para iteración hacia adelante

$$\Psi(x_0 + h) = \Psi(x_0) + h\Psi'(x_0) + \frac{h^2}{2}\Psi''(x_0) + \frac{h^3}{6}\Psi'''(x_0) + \frac{h^4}{24}\Psi^{(4)}(x_0) + \frac{h^5}{120}\Psi^{(5)}(x_0) + \mathcal{O}(h^6)$$

Iteración hacia atrás

$$\Psi(x_0 - h) = \Psi(x_0) - h\Psi'(x_0) + \frac{h^2}{2}\Psi''(x_0) - \frac{h^3}{6}\Psi'''(x_0) + \frac{h^4}{24}\Psi^{(4)}(x_0) - \frac{h^5}{120}\Psi^{(5)}(x_0) + \mathcal{O}(h^6)$$

Obtenemos las diferencias centrales haciendo.

$$\Psi(x_0 + h) + \Psi(x_0 - h) = 2\Psi(x_0) + h^2\Psi''(x_0) + \frac{h^4}{12}\Psi^{(4)}(x_0) + \mathcal{O}(h^6) \quad (2.B)$$

Buscamos la forma de iterar una ecuación diferencial de segundo orden, por lo tanto reordenamos la relación (2.B) para $h^2\Psi''(x_0)$.

$$-h^2\Psi''(x_0) = -\Psi(x_0 + h) + 2\Psi(x_0) - \Psi(x_0 - h) + \frac{h^4}{12}\Psi^{(4)}(x_0) + \mathcal{O}(h^6) \quad (3.B)$$

Utilizamos la fórmula de los tres puntos para calcular la segunda derivada del último término. Expresamos $\Psi''(x_0) = -(f(x_0)\Psi(x_0))$.

$$\frac{h^4}{12}\Psi^{(4)}(x_0) = -\frac{h^4}{12}\Psi^{(2)}(f(x_0)\Psi(x_0)) \quad (4.B)$$

Tenemos entonces:

$$\frac{h^4}{12}\Psi^{(4)}(x_0) = -\frac{h^4}{12} \frac{f(x_0 + h)\Psi(x_0 + h) - 2f(x_0)\Psi(x_0) + f(x_0 - h)\Psi(x_0 - h)}{h^2} \quad (5.B)$$

Antes de continuar es preciso organizar la relación de recurrencia (3.B) de forma que x_0 represente en la iteración siempre el n-ésimo término. Es decir los x_n los cuales están separados entre sí por una pequeña distancia que llamamos h . Con esto en consideración, podemos cambiar los términos teniendo en cuenta las igualdades:

$$\Psi_{n+1} = \Psi(x_n + h)$$

$$\Psi_{n-1} = \Psi(x_n - h)$$

Con esto reescribimos (3.B) y teniendo en cuenta el resultado en (5.B) tenemos:

$$-h^2 \Psi_n'' = -\Psi_{n+1} + 2\Psi_n - \Psi_{n-1} - \frac{h^4}{12} \frac{f_{n+1}\Psi_{n+1} - 2f_n\Psi_n + f_{n-1}\Psi_{n-1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^6)$$

$$-h^2 \Psi_n'' = -\Psi_{n+1} + 2\Psi_n - \Psi_{n-1} - \frac{h^2}{12} f_{n+1}\Psi_{n+1} - 2f_n\Psi_n + f_{n-1}\Psi_{n-1} + \mathcal{O}(h^6)$$

Sabemos de (4) que $\Psi_n'' = -f_n\Psi_n$.

$$h^2 f_n \Psi_n = -\Psi_{n+1} + 2\Psi_n - \Psi_{n-1} - \frac{h^2}{12} f_{n+1}\Psi_{n+1} - 2f_n\Psi_n + f_{n-1}\Psi_{n-1} + \mathcal{O}(h^6)$$

Agrupamos términos y resolvemos para Ψ_{n+1} :

$$h^2 f_n \Psi_n = -\Psi_{n+1} + 2\Psi_n - \Psi_{n-1} - \frac{h^2 f_{n+1}\Psi_{n+1}}{12} + \frac{h^2 2f_n\Psi_n}{12} - \frac{h^2 f_{n-1}\Psi_{n-1}}{12} + \mathcal{O}(h^6)$$

$$h^2 f_n \Psi_n = -\Psi_{n+1} - \frac{h^2 f_{n+1}\Psi_{n+1}}{12} - \frac{h^2 f_{n-1}\Psi_{n-1}}{12} - \Psi_{n-1} + \frac{h^2 2f_n\Psi_n}{12} + 2\Psi_n + \mathcal{O}(h^6)$$

$$h^2 f_n \Psi_n = -\Psi_{n+1} - \frac{h^2 f_{n+1}\Psi_{n+1}}{12} - \frac{h^2 f_{n-1}\Psi_{n-1}}{12} - \Psi_{n-1} + \frac{h^2 2f_n\Psi_n}{12} + 2\Psi_n + \mathcal{O}(h^6)$$

$$\Psi_{n+1} \left(1 + \frac{h^2 f_{n+1}}{12} \right) = -\Psi_{n-1} \left(\frac{h^2 f_{n-1}}{12} + 1 \right) + \Psi_n \left(\frac{h^2 2f_n}{12} + 2 - h^2 f_n \right) + \mathcal{O}(h^6)$$

$$\Psi_{n+1} = \frac{\Psi_n \left(\frac{h^2 f_n}{6} + 2 - h^2 f_n \right) - \Psi_{n-1} \left(\frac{h^2 f_{n-1}}{12} + 1 \right)}{\left(1 + \frac{h^2 f_{n+1}}{12} \right)} + \mathcal{O}(h^6)$$

$$\Psi_{n+1} = \frac{\Psi_n \left(2 - \frac{5h^2 f_n}{6} \right) - \Psi_{n-1} \left(1 + \frac{h^2 f_{n-1}}{12} \right)}{\left(1 + \frac{h^2 f_{n+1}}{12} \right)} + \mathcal{O}(h^6)$$

O lo que es igual:

$$\Psi_n = \frac{\Psi_{n-1} \left(2 - \frac{5h^2 f_{n-1}}{6} \right) - \Psi_{n-2} \left(1 + \frac{h^2 f_{n-2}}{12} \right)}{\left(1 + \frac{h^2 f_n}{12} \right)} + \mathcal{O}(h^6) \quad (6.B)$$

De esta forma obtenemos la relación de recurrencia (6.B) o método de numerov con su término de error.

Apéndice C

Tablas comparativas de valores propios y su porcentaje de error.

En el capítulo 4, se expusieron los valores propios obtenidos por el programa para configuraciones particulares de los pozos de potencial cuadrado y armónico, junto con los valores obtenidos por método gráfico y analítico respectivamente de las mismas configuraciones, esto como parte de la prueba de funcionalidad del programa. En este anexo, se exponen la totalidad de los errores porcentuales de cada uno de estos valores teniendo como valor real el obtenido de forma analítica o gráfica y el experimental el logrado por el programa.

1.C. valores de prueba. Pozo de potencial cuadrado finito.

V. M grafico	V Programa	E porcentual	V. M grafico	V Programa	E porcentual
2,295	2	0,21786492	1,89	1,8894	0,03174603
8,137	8	0,08602679	2,944	2,9432	0,02717391
0,819	0,8185	0,06105006	4,221	4,2201	0,02132196
3,221	3	0,12418504	0,069	0,0691	0,14492754
6,945	7	0,06335493	0,276	0,2763	0,10869565
0,249	0,249	0	0,621	0,6214	0,06441224
0,994	0,994	0	1,104	1,1038	0,01811594
2,227	2,225	0,08980692	1,723	1,7225	0,02901915
3,928	3,926	0,0509165	2,477	2,4764	0,02422285
6,058	6,055	0,04952129	0,0452	0,0451	0,22123894
8,508	8,506	0,02350729	0,1808	0,1807	0,05530973
0,119	0,1186	0,33613445	0,4066	0,4065	0,0245942
0,474	0,474	0	0,7226	0,7223	0,04151675
1,065	1,0651	0,00938967	1,1284	1,128	0,03544842
			1,6236	1,623	0,03695492

Tabla.1. Comparación de los valores tomados de las tablas (4.1a y 4.1b) y sus errores porcentuales.

V. M grafico	V Programa	E porcentual	V. M grafico	V Programa	E porcentual
1,7551	2	0,13104666	2,7384	2,73774	0,02410167
4,9991	5	0,19803565	3,8723	3,87172	0,01497818
0,7036	0,7029	0,09948835	0,0662	0,06542	1,17824773
2,6879	3	0,0632464	0,2641	0,26142	1,01476713
4,9979	5	2,36299246	0,5941	0,58721	1,15973742
0,2274	0,22448	1,28408091	1,0535	1,04126	1,16184148
0,9158	0,892	2,5988207	1,6399	1,621	1,1525093
2,0263	1,98085	2,24300449	2,3488	2,32306	1,09587875
3,5093	3,43246	2,18961046	0,0442	0,04322	2,21719457
4,9929	4,95795	0,69999399	0,1744	0,17281	0,91169725
0,1121	0,11205	0,04460303	0,3906	0,38848	0,54275474
0,4474	0,44723	0,03799732	0,7024	0,68974	1,8023918
1,0025	1,00222	0,02793017	1,081	1,07579	0,48196115
1,7708	1,77027	0,02992998	1,5552	1,54541	0,62950103

Tabla.2. Comparación de los valores tomados de las tablas (4.2a y 4.2b) y sus errores porcentuales.

V. M grafico	V Programa	E porcentual	V. M grafico	V Programa	E porcentual
0,196	0,1959	0,05102041	3,8108	3,8088	0,05248242
0,7654	0,7652	0,02613013	5,8322	5,8302	0,03429238
1,6157	1,6155	0,01237854	7,9148	7,9147	0,00126346
0,222	0,2219	0,04504505	0,2537	0,2535	0,07883327
0,88	0,8796	0,04545455	1,013	1,0121	0,08884501
1,9419	1,9412	0,03604717	2,2709	2,269	0,08366727
3,3053	3,3047	0,01815266	4,0136	4,0106	0,07474586
0,2351	0,2349	0,08507018	6,2141	6,2102	0,0627605
0,9354	0,9349	0,05345307	8,8107	8,8068	0,04426436
2,0831	2,0821	0,04800538	0,2573	0,257	0,11659541
3,6334	3,632	0,0385314	1,0276	1,0266	0,09731413
5,4362	5,4354	0,01471616	2,3053	2,3032	0,09109443
0,2434	0,2432	0,08216927	4,0797	4,0763	0,08333946
0,9701	0,9694	0,07215751	6,3305	6,3259	0,07266409
2,1682	2,1668	0,06456969	9,0169	9,0117	0,05766949

Tabla.3. Comparación de los valores tomados de las tablas (4.3a y 4.3b) y sus errores porcentuales.

V. M grafico	V Programa	E porcentual	V. M grafico	V Programa	E porcentual
1,0924	1,092	0,03661662	7,1858	7,1828	0,041749
1,5844	1,5828	0,1009846	2,4353	2,4292	0,25048249
1,8964	1,8937	0,14237503	8,874	8,8637	0,11606942
5,8773	5,8769	0,00680585	2,5522	2,5451	0,27819136
2,1212	2,1174	0,17914388	9,4693	9,455	0,15101433

Tabla.4. Comparación de los valores tomados de las tablas (4.4a y 4.4b) y sus errores porcentuales.

2.C. Valores de prueba Oscilador armónico Cuántico

V. ecuación	V Programa	E porcentual	V. ecuación	V Programa	E porcentual
0,2	0,2	0	9	8,9999	0,00111111
0,6	0,6	0	11	11	0
1	1	0	1,5	1,5	0
1,4	1,4	0	4,5	4,5	0
1,8	1,8	0	7,5	7,499	0,01333333
2,2	2,2	0	10,5	10,5	0
0,5	0,5	0	13,5	13,499	0,00740741
1,5	1,5	0	16,5	16,499	0,00606061
2,5	2,5	0	2	2	0
3,5	3,5	0	6	5,999	0,01666667
4,5	4,5	0	10	9,999	0,01
5,5	5,49999	0,00018182	14	13,999	0,00714286
1	1	0	18	17,999	0,00555556
3	3	0	22	21,999	0,00454545
5	5	0	2,5	2,5	0
7	6,9999	0,00142857	7,5	7,4999	0,00133333

Tabla.5. Comparación de los valores tomados de las tablas (4.5a y 4.5b) y sus errores porcentuales