



TECNOLÓGICO DE MONTERREY

MECÁNICA CUÁNTICA
PROYECTO/TAREA 1ER PARCIAL

Sistemas simples en 1D (Potencial de Lennard-Jones)

Nombres:

Carla Judith López Zurita	A00822301
Rubén Darío Casso de León	A01196975
Alejandro Salinas de León	A01282503

Profesor:

Dr. Julio César Gutiérrez Vega

Viernes 27 de marzo, 2020

1 Introducción al problema

El problema que efervesce de nuestro profesor a fin de ser resuelto por este proyecto nos hace sumergirnos en búsquedas a fin de poder convenir en una definición para el potencial de Lennard-Jones. Este modelo matemático es muy sencillo y representa el comportamiento de un par de moléculas sujetas a dos fuerzas distintas siendo la de dispersión aquella que la relaciona con grandes distancias, así como la de repulsión que actúa en distancias pequeñas. Concretando esta explicación a un ejemplo, podemos recordar que el más claro de fuerzas centrales es el aplicado a las moléculas diatómicas.

Para nuestro proyecto, nos concentramos en la molécula Mg_2 , misma a la cual le calcularemos su espectro de energía que satisface la ecuación no lineal $f(E) = 0$, donde

$$f(E) = \frac{\sqrt{2\mu}}{\pi} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{E - \left[\frac{a}{r^{12}} - \frac{b}{r^6} + (l^2 + l + \frac{1}{4}) \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \right]} dr - (n_r + \frac{1}{2})\hbar = 0 \quad (1)$$

Para hacerlo, hicimos uso de MATLAB creando un algoritmo que pudiera devolvernos los valores de las eigenenergías. En los siguientes apartados el trabajo podrán encontrar tablas sobre valores energéticos del estado base de Mg_2 que relacionen estos resultados con valores de números cuánticos azimutales $l = 0$, $l = 1$ y $l = 2$ y recorriéndolas por los números cuánticos radiales del 0 al 10. Asimismo incluimos gráficas de los niveles de energía para cada número cuántico azimutal y que nos muestren los valores de potencial de energía que entren en nuestra curva de potencial dada por Lennard-Jones.

2 Resultados

A partir del código implementado, se calcularon las energías para el estado base de la molécula Mg_2 , replicando la tabla presentada en el artículo ya mencionado. A continuación se muestran los resultados aproximados obtenidos:

n_R	l	$E \times 10^{-3}$ (Hartree)
0	0	-1.7957
1	0	-1.4901
2	0	-1.2184
3	0	-0.98032
4	0	-0.77414
5	0	-0.59982
6	0	-0.45175
7	0	-0.32992
8	0	-0.23245
9	0	-0.1556
10	0	-0.097497

Table 1: Energías tabuladas para valores $l = 0$. 1 hartree = 27.212 eV

Asimismo, se replica la gráfica que muestra los diferentes valores de la energía para cada número cuántico radial de $n_R = 0$ a $n_R = 10$, delimitados por la curva negra de potencial.

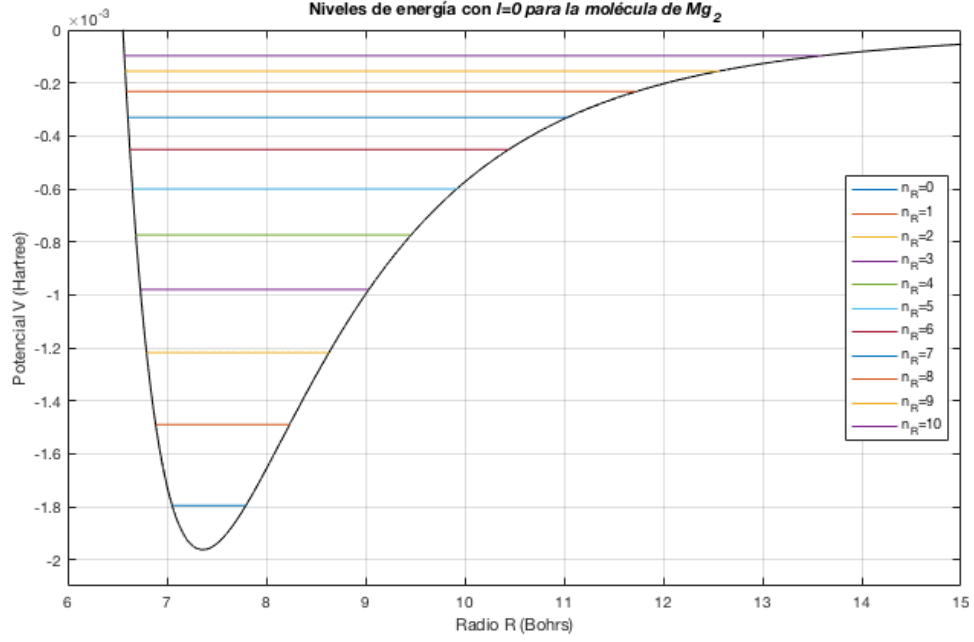


Figure 1: Niveles de energía en el estado base $l=0$ para la molécula de Mg_2

Los resultados del artículo son extendidos para incluir las energías para el número cuántico azimutal $l = 1$, utilizando el mismo proceso que en el caso anterior.

n_R	l	$E \times 10^{-3}$ (Hartree)
0	1	-1.7955
1	1	-1.4888
2	1	-1.2173
3	1	-0.9789
4	1	-0.7738
5	1	-0.5980
6	1	-0.4515
7	1	-0.3303
8	1	-0.2307
9	1	-0.1545
10	1	-0.0979

Table 2: Energías tabuladas para valores $l = 1$

Su respectiva gráfica se muestra a continuación:

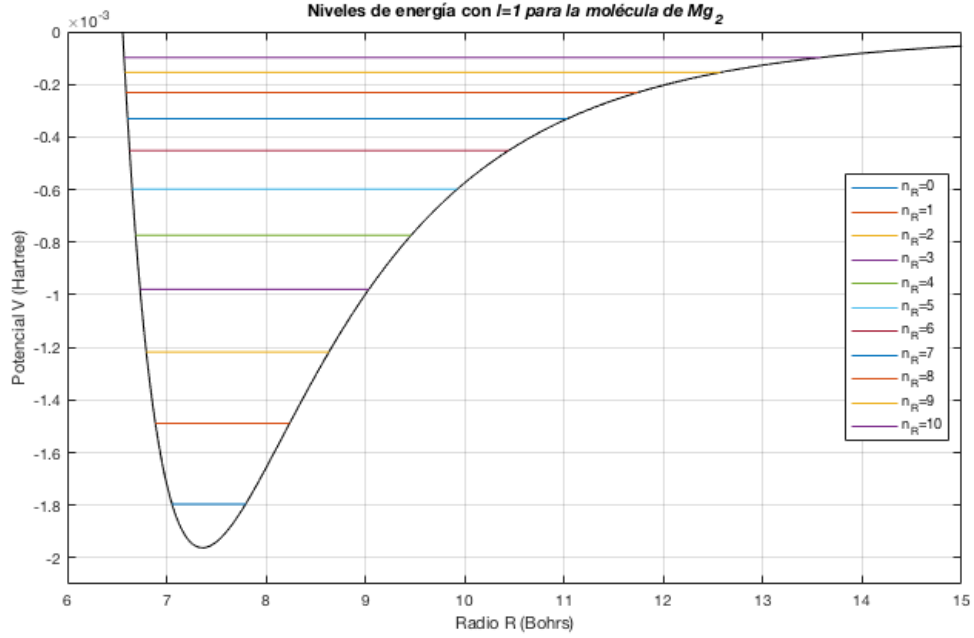


Figure 2: Niveles de energía en $l=1$ para la molécula de Mg_2

Por último, se usa el código implementado una vez más para el número cuántico azimutal $l = 2$:

n_R	l	$E \times 10^{-3}$ (Hartree)
0	2	-1.7934
1	2	-1.4864
2	2	-1.215
3	2	-0.97912
4	2	-0.77322
5	2	-0.59727
6	2	-0.44939
7	2	-0.32772
8	2	-0.23039
9	2	-0.15364
10	2	-0.0954

Table 3: Energías tabuladas para valores $l = 2$

Por su parte, estos datos tabulados arrojan una gráfica de potencial V contra radio R , como se muestra en la siguiente figura:

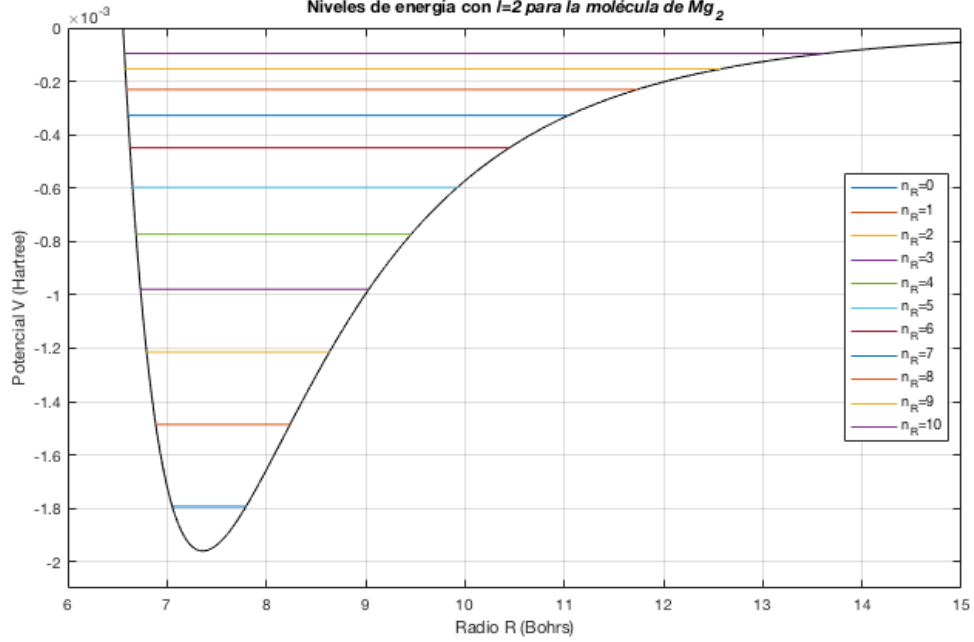


Figure 3: Niveles de energía en $l=2$ para la molécula de Mg_2

3 Conclusiones

Primeramente, resulta necesario señalar que nuestro método de integración trapezoidal se vio limitado al no ser lo suficientemente robusto, puesto que notamos algunas discrepancias en nuestras tablas de resultados con las que se encuentran en los artículos. Sabemos, además, que el origen de las variaciones se debe a que para valores pequeños del número cuántico azimutal, debe usarse la ecuación sin aproximación, contrario a cuando se recurre a valores grandes de l . A pesar de esto, el comportamiento general de los resultados es bastante similar, de forma que para $n_R = 0$, la energía se encuentra por debajo de -1.8×10^{-3} Hartree, y va incrementando hasta casi llegar a 0 para mayores valores n_R . Notamos, además, que a simple vista las gráficas para diferentes l pueden parecer idénticas. No lo son, pero se asemejan mucho gracias a la poca variación de los valores de energía conforme aumentamos l ; pues, claro está, estos siguen siendo pequeños.

Sin duda alguna, otro de los eslabones a mejorar en nuestro código, radica en usar más de 100,000 puntos que fueron los que utilizamos en nuestro proyecto. Esto a fin de dar con valores más precisos.

Finalmente, queda por comentar que el proyecto supuso en desafío en el equipo debido a la dificultad para poder conciliar en una misma gráfica todos los niveles de energía dentro de la curva de potencial de Lennard-Jones. Empero, es menester reconocer que el trabajo en equipo y la resiliencia del mismo, fueron factor clave para poder llegar a los ansiados resultados, concretamente a las gráficas mostradas en la sección anterior.

4 Referencias

1. Curtis, L., Ellis, D., Larkoski, A. Numerical implementation of Einstein-Brillouin-Keller quantization for arbitrary potentials. *American Journal of Physics*, pages 01-07, 2006. Recuperado de: <http://dx.doi.org/10.1119/1.2192788>

5 Apéndice: Código implementado

```
1 clear all; tic
2
3 format long;
4 mu = (12 + 24*1836)/2; %masa at mica
5 a = 4.96e7; b = 624; %constantes
6 l = 0; %n mero cu ntico azimutal l
7
8 % Potencial V
9 V = @(R) (1.^2+1+1./4)./(2*mu.*R.^2)+a./(R.^12)-b./(R.^6);
10
11 %% Valor de E inicial
12 R = linspace(6,20,100000); %radio
13 hr=R(2)-R(1);
14 i1=(R(2):hr:R(end)); %i+1
15 dV=(V(i1)-V(i1-2*hr))./(2*hr);
16 K = 1:length(i1)-1;
17 E = 0.5*V(i1(dV(K).*dV(K+1)<0));
18
19 %% Integraci n trapezoidal
20 EE = linspace(2*E,-0.00009,1000); %L mites arbitrarios para
    EE
21 It = zeros(1,length(EE));
22 f = It;
23 Ef = zeros(1,11);
24
25 for n = 0:10 %n mero c antico radial n
26     for t = 1:length(EE)
27         % Encontrar valores extremos de r tal que el radical
            es cero
28         xr = R((EE(t)-V(R)).*(EE(t)-V(R+hr))<0);
29         k=linspace(xr(1),xr(2),10000);
30         % Integral y funci n completa
31         It(t) = trapz(k,sqrt(EE(t)-V(k)));
32         f(t) = sqrt(2*mu)/pi*It(t)-(n+1/2);
33     end
34     k = 1:length(f)-1;
```

```

35     Ef(n+1) = EE(real(f(k)).*real(f(k+1))<0);
36
37     figure(1); plot(R,V(R),'k') %Gráfica de potencial V(R)
38     hold on;
39
40     %Mejor visualización de gráficas
41     xlim([6 15]);
42     ylim([-0.0021 0]);
43     grid on
44     title('Niveles de energía con \it{l}=0 para la
           molécula de Mg_2');
45     xlabel('Radio R (Bohrs)');
46     ylabel('Potencial V (Hartree)');
47
48     NivelE = NaN(1,size(R,2));
49     NivelE(V(R) <= Ef(n+1)) = Ef(n+1); %Condicional para
           que las líneas de Ef caigan dentro de V(R)
50     p(n+1) = plot(R,NivelE); %Gráfica de líneas de Ef
51 end
52     legend([p(1) p(2) p(3) p(4) p(5) p(6) p(7) p(8) p(9) p
           (10) p(11)],{'n_R=0','n_R=1','n_R=2','n_R=3','n_R=4',
           'n_R=5','n_R=6','n_R=7','n_R=8','n_R=9','n_R=10'},'
           Location','east');
53 toc
54
55     finalText=['Las energías para l=',num2str(1),' son:',
           num2str(Ef)];
56     disp(finalText) %Display de resultados

```