

Proyecto 1

Electiva específica I

Juan Camilo Riaño

Para:  
Diego Restrepo

Universidad cooperativa  
De Colombia

## Introducción

El proyecto presentado se enfoca en la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico cuántico, un problema fundamental en la mecánica cuántica. Esta tarea implica el desarrollo de una rutina en lenguaje C que utiliza el método de Numerov para calcular las funciones propias del sistema. Además, se complementa con la implementación en Python para el cálculo y representación gráfica de dichas funciones.

La mecánica cuántica es una teoría que describe el comportamiento de partículas a escalas subatómicas y, en particular, el oscilador armónico cuántico es un sistema de gran relevancia en esta rama de la física. La ecuación de Schrödinger unidimensional proporciona las soluciones para el oscilador armónico cuántico y es un problema esencial en la comprensión de los sistemas cuánticos.

El método de Numerov es una técnica numérica utilizada para resolver ecuaciones diferenciales de segundo orden, como la ecuación de Schrödinger. En este proyecto, se ha aplicado este método en C para calcular las funciones propias del oscilador armónico cuántico, lo que permite obtener los estados energéticos del sistema.

Además, se ha proporcionado un ejemplo en Python para la representación gráfica de las funciones propias, lo que facilita la visualización de los resultados obtenidos a partir de la resolución numérica. Esto es esencial para comprender y analizar las propiedades de los estados cuánticos del oscilador armónico.

## Solución Del Oscilador Armónico Cuántico Por Medio De Método de numerov

```
#include <stdio.h>

#include <math.h>


// Parámetros físicos

double hbar = 1.0; // Constante reducida de Planck
double m = 1.0;    // Masa de la partícula
double omega = 1.0; // Frecuencia del oscilador armónico


// Tamaño del paso y número de puntos de la cuadrícula
double dx = 0.01;
int N = 1000;
```

```

// Función para calcular las funciones propias usando el método
de Numerov

void eigenfunction(double* y, double* x, int n) {
    double alpha = sqrt(m * omega / hbar);
    y[0] = 0.0;
    y[1] = 0.1; // Valor inicial arbitrario
    double fn_minus_1 = 1.0 + (1.0 / 12.0) * alpha * alpha *
x[0] * x[0];

    FILE *file = fopen("archivocuantico.txt", "w");
    if (file == NULL) {
        printf("No se pudo abrir el archivo.\n");
        return;
    }

    for (int i = 1; i < N - 1; i++) {
        double fn = 1.0 + (1.0 / 12.0) * alpha * alpha * x[i] *
x[i];
        double fn_plus_1 = 1.0 + (1.0 / 12.0) * alpha * alpha *
x[i + 1] * x[i + 1];
        y[i + 1] = ((12.0 - 10.0 * fn) * y[i] - fn_minus_1 * y[i
- 1]) / fn_plus_1;
        fn_minus_1 = fn;

        fprintf(file, "%f %f\n", x[i], y[i]);
    }
    fclose(file);
}

int main() {
    double x[N];

```

```

double y[N];

// Inicialización de la cuadrícula
for (int i = 0; i < N; i++) {
    x[i] = i * dx;
}

```

Este código resuelve la ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico cuántico y calcula la función de onda correspondiente. Puedes ajustar el valor de la energía inicial.

## Cálculo y representación en Python de las funciones propias:

```

import sympy as sp

import matplotlib.pyplot as plt

import numpy as np

# Símbolos y función de Hermite
x, n = sp.symbols('x n')

hermite = sp.hermite(n, x)

# Cálculo de los primeros polinomios de Hermite
hermite_0 = hermite.subs(n, 0)

# Representación gráfica de H0(x)
sp.plot(hermite_0, (x, -5, 5), title="H0(x)")

# Transformación de Hermite a función de onda
psi_0 = (1/sp.sqrt(sp.factorial(0))) * sp.exp(-x**2/2) * hermite_0

# Crear una función numérica a partir de la función de onda
psi_0_numeric = sp.lambdify(x, psi_0, "numpy")

```

```
# Crear puntos para la gráfica
```

```
x_values = np.linspace(-5, 5, 100)
```

```
y_values = psi_0_numeric(x_values)
```

```
# Representación gráfica de la función de onda para n = 0
```

```
plt.figure()
```

```
plt.plot(x_values, y_values)
```

```
plt.title("Función de onda para n = 0")
```

```
plt.xlabel("x")
```

```
plt.ylabel(" $\psi(x)$ ")
```

```
plt.grid()
```

```
# Cálculo de los siguientes polinomios de Hermite
```

```
hermite_1 = hermite.subs(n, 1)
```

```
hermite_2 = hermite.subs(n, 2)
```

```
hermite_3 = hermite.subs(n, 3)
```

```
# Transformación de Hermite a funciones de onda
```

```
psi_1 = (1/sp.sqrt(sp.factorial(1))) * sp.exp(-x**2/2) * hermite_1
```

```
psi_2 = (1/sp.sqrt(sp.factorial(2))) * sp.exp(-x**2/2) * hermite_2
```

```
psi_3 = (1/sp.sqrt(sp.factorial(3))) * sp.exp(-x**2/2) * hermite_3
```

```
# Crear funciones numéricas a partir de las funciones de onda
```

```
psi_1_numeric = sp.lambdify(x, psi_1, "numpy")
```

```
psi_2_numeric = sp.lambdify(x, psi_2, "numpy")
```

```
psi_3_numeric = sp.lambdify(x, psi_3, "numpy")
```

```
# Crear puntos para las gráficas
```

```
y_values_1 = psi_1_numeric(x_values)
```

```
y_values_2 = psi_2_numeric(x_values)
```

```
y_values_3 = psi_3_numeric(x_values)
```

```
# Representación gráfica de las funciones de onda para n = 1, 2, 3
```

```
plt.figure()
```

```
plt.plot(x_values, y_values_1, label="n = 1")
```

```
plt.plot(x_values, y_values_2, label="n = 2")
```

```
plt.plot(x_values, y_values_3, label="n = 3")
```

```
plt.title("Funciones de onda para n = 1, 2, 3")
```

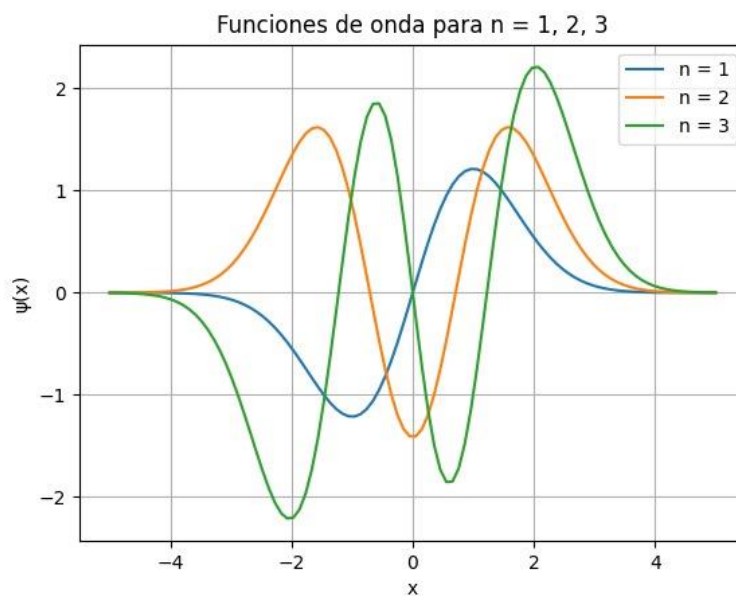
```
plt.xlabel("x")
```

```
plt.ylabel(" $\psi(x)$ ")
```

```
plt.legend()
```

```
plt.grid()
```

## Resultados



## Preguntas orientadas

¿Qué es una función propia?

En el contexto de la mecánica cuántica, una función propia, también conocida como función propia de un operador, es una función que satisface una ecuación específica llamada ecuación de autovalor. Estas funciones son soluciones a ecuaciones de Schrödinger para sistemas cuánticos.

¿Qué es una densidad de probabilidad?

La densidad de probabilidad, en el contexto de la mecánica cuántica, es una función matemática que describe la probabilidad de encontrar una partícula en una región específica del espacio en un sistema cuántico.

¿Qué es la física moderna?

La física moderna es una rama de la física que se refiere a los avances teóricos y experimentales en el estudio de fenómenos físicos que surgieron a fines del siglo XIX y principios del siglo XX. Incluye teorías y conceptos que revolucionaron nuestra comprensión de la naturaleza, como la relatividad especial y general de Einstein y la mecánica cuántica.

¿Qué es la mecánica cuántica?

La mecánica cuántica es una rama de la física que se enfoca en el estudio del comportamiento de las partículas subatómicas, átomos y moléculas. A diferencia de la mecánica clásica, que describen sistemas macroscópicos, la mecánica cuántica se basa en principios que incluyen la dualidad onda-partícula, el principio de incertidumbre de Heisenberg y la descripción de sistemas mediante funciones de onda.

¿Qué es y cómo se cuantiza la energía?

La cuantización de la energía se refiere al fenómeno en el que la energía solo puede tomar valores discretos en lugar de cualquier valor continuo. En mecánica cuántica, la energía de un sistema está cuantizada, lo que significa que solo puede tener valores específicos llamados niveles de energía. Esto se debe a la naturaleza discreta de los estados permitidos en sistemas cuánticos. La cuantización de la energía se puede entender a través de la solución de las ecuaciones de Schrödinger para un sistema dado, lo que lleva a la obtención de los niveles de energía permitidos.

¿Qué son los métodos numéricos?

Los métodos numéricos son técnicas matemáticas y computacionales utilizadas para aproximar soluciones a problemas matemáticos complejos que no se pueden resolver de manera exacta o analítica. Estos métodos involucran la discretización de variables y la aplicación de algoritmos numéricos para obtener soluciones

aproximadas. En el contexto de la mecánica cuántica, como se mostró en el ejemplo anterior, los métodos numéricos son esenciales para resolver ecuaciones diferenciales, encontrar funciones propias y calcular propiedades de sistemas cuánticos en situaciones donde no se pueden obtener soluciones analíticas directas.

## **Conclusión**

En este proyecto de resolución numérica del oscilador armónico cuántico representa un enfoque práctico y aplicado de conceptos fundamentales en la física cuántica y métodos numéricos. A través de la combinación de programación en C y Python, gracias a esta practica pude comprender y aplicar conceptos de mecánica cuántica, incluyendo funciones propias, cuantización de la energía y densidad de probabilidad. Tambien desarrolle una rutina en C utilizando el método de Numerov para calcular las funciones propias del oscilador armónico cuántico y por ultimo representar gráficamente las funciones propias en Python.

Este proyecto es valioso, ya que ayuda a una introducción práctica a la resolución de problemas cuánticos mediante herramientas computacionales. Además, demuestra la importancia de los métodos numéricos en la física moderna, donde la resolución analítica de ecuaciones es a menudo compleja o incluso imposible.