

• Métodos computacionales: Alejandro Segura

### • Integración

- a) Incluir el código Notebook (.ipynb).
- b) Guardar la información en una carpeta llamada Semana5\_Nombre1\_Nombre2
- c) Comprimir en formato zip la carpeta para tenga el nombre final Semana5\_Nombre1\_Nombre2.zip
- d) Hacer una sola entrega por grupo.

### Contents

1	Integration	3
	1.1 Gauss-Hermite quadrature	4

## List of Figures

# 1 Integration

#### 1.1 Gauss-Hermite quadrature

1. (30 Points) La cuadratura de Gaus-Hermite está definida para integrales de la forma:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-x^2}dx \tag{1}$$

que tiene la siguiente representación en cuadraturas:

$$I \approx \sum_{i=1}^{N} \omega_i f(x_i) \tag{2}$$

donde los puntos  $x_i$  son las raíces de los polinomios de Hermite  $(H_n(x))$  y la formula de pesos está dada por:

$$\omega_i = \frac{2^{n-1} n! \sqrt{\pi}}{n^2 H_{n-1}(r_i)^2} \tag{3}$$

El estado de un oscilador armónico en mecánica cuántica está dado por la funciones de probabilidad:

$$\psi_n(\mathbf{S}) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\mathbf{S}^2/2} H_n(\xi) \tag{4}$$

donde  $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ . Haga  $\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} = 1$ , es decir,  $\xi = x$  para la aplicación numérica. Estime numéricamente el valor cuadrático medio de la posición de la partícula en el primer estado exitado (n=1). El valor exacto de la integral está dado por:

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_1(x)|^2 x^2 dx = 3/2$$
 (5)

El polinomio de Hermite de orden 1 está dado por:

$$H_1(x) = 2x \tag{6}$$

La formula de rodrigues que genera los polinomios de Hermite está dada por:

$$H_n(\mathbf{Q}) = (-1)^n e^{\mathbf{Q}^2} \frac{d^n}{d\mathbf{Q}^n} e^{-\mathbf{Q}^2} \tag{7}$$

Usar esta formula más el paquete Sympy para encontrar los ceros de los polinomios y los pesos de la cuadratura.