

Examen Tema 2 - Operaciones matemáticas básicas - 2a. Parte

Curso de Física Computacional

M. en C. Gustavo Contreras Mayén

1. **(2 puntos.)** La función gamma $\Gamma(x)$, se define como la siguiente integral

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt$$

que converge para todo x positivo, pese a que para $0 < x < 1$ el integrando tiene una divergencia en $t = 0$.

Calcula numéricamente a partir de la definición anterior, la Γ para $x = 0$ y $x = 1/2$, valores para los cuales se conocen los resultados analíticos:

$$\Gamma(10) = 9! = 362880$$

$$\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$$

En cada caso debes:

- a) indicar el cambio de variable utilizado.
 - b) el número de puntos utilizados en la discretización.
 - c) el método de integración.
 - d) el resultado obtenido.
 - e) el error cometido respecto al valor analítico.
2. **(2 puntos.)** Evalúa numéricamente las siguientes integrales:

$$I_1 = \int_0^{\infty} e^{-x} \ln x dx$$

$$I_2 = \int_0^1 \frac{1+x}{1-x^3} \ln \frac{1}{x} dx$$

El problema consiste en resolver las integrales con algún cambio de variable para tener un integrando suave en un intervalo finito.

Se debe de obtener un resultado razonablemente bueno, teniendo que evaluar el integrando final con el menor número (N) de veces que sea posible. Como criterio de convergencia debes de usar alguna cantidad como

$$\epsilon = \frac{I - I_N}{I} < 10^{-n}$$

con $n = 2, 3, 4, 5, 6$ En cada caso debes:

- a) indicar el(los) cambio(s) de variable utilizado(s).

- b) el número de puntos utilizados en la discretización.
- c) el método de integración.
- d) el resultado obtenido.
- e) el error cometido respecto al valor de I.

Nota: no se vale usar integración por partes.

3. **(6 puntos.)** Para muchos efectos la fuerza entre átomos puede ser tratada exitosamente con el potencial central, llamado de Lennard-Jones

$$V = 4V_0 \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - \left(\frac{a}{r} \right)^6 \right]$$

cuyo valor mínimo es V_0 y se anula cuando r coincide con el radio de Bohr. Una partícula atrapada en este potencial (energía menor que cero), tiene un movimiento en el intervalo (r_{\min}, r_{\max}) donde ambos radios son mayores que a . Cuánticamente solo hay un conjunto discreto de energías E_n posibles. Clásicamente $E = \frac{p^2}{2m} + V(r)$ o equivalentemente, la magnitud del momento depende de r en la forma $p(r) = \sqrt{2m(E - V(r))}$.

Una forma aproximada de plantear el problema para encontrar los valores de los niveles cuánticos E_n consiste en exigir la *condición de Bohr-Sommerfeld*

$$\oint \frac{p(R)}{\hbar} dr = 2\pi \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

con n entero no negativo. La integral es sobre un ciclo completo de oscilación. El problema se adimensionaliza haciendo las sustituciones

$$E = V_0 \mathcal{E}, \quad r = a\rho, \quad V_0 = \frac{\gamma^2 \hbar^2}{2a^2 m}$$

Para la molécula de hidrógeno el valor de $\gamma = 21.7$, para el O_2 , $\gamma \sim 150$.

La condición integral de arriba se convierte en la exigencia que se anule la función

$$F_n(\mathcal{E}_n) = \gamma \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} \sqrt{\mathcal{E}_n - 4 \left(\frac{1}{\rho^{12}} - \frac{1}{\rho^6} \right)} d\rho - \pi \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Es decir, el problema consiste en encontrar los ceros de F_n dados $\gamma = 150$ y $n = 0, 1, 2$, con $-1 < \mathcal{E}_n < 0$ sabiendo que

$$\rho_{\min} = \left(\frac{2 - 2\sqrt{\delta_n}}{1 - \delta_n} \right)^{1/6}, \quad \rho_{\max} = \left(\frac{2 + 2\sqrt{\delta_n}}{1 - \delta_n} \right)^{1/6}$$

donde $\delta_n = 1 + \mathcal{E}_n$. El programa que realices para resolver este problema, deber de ser útil para otros potenciales $V(r)$, como por ejemplo el potencial de Yukawa

$$V(r) = \frac{\kappa}{r} e^{-r/a}$$

En la búsqueda de los ceros debes usar el método de la secante (indicando, entre otras cosas, la tolerancia usada y cuántas iteraciones fueron necesarias)