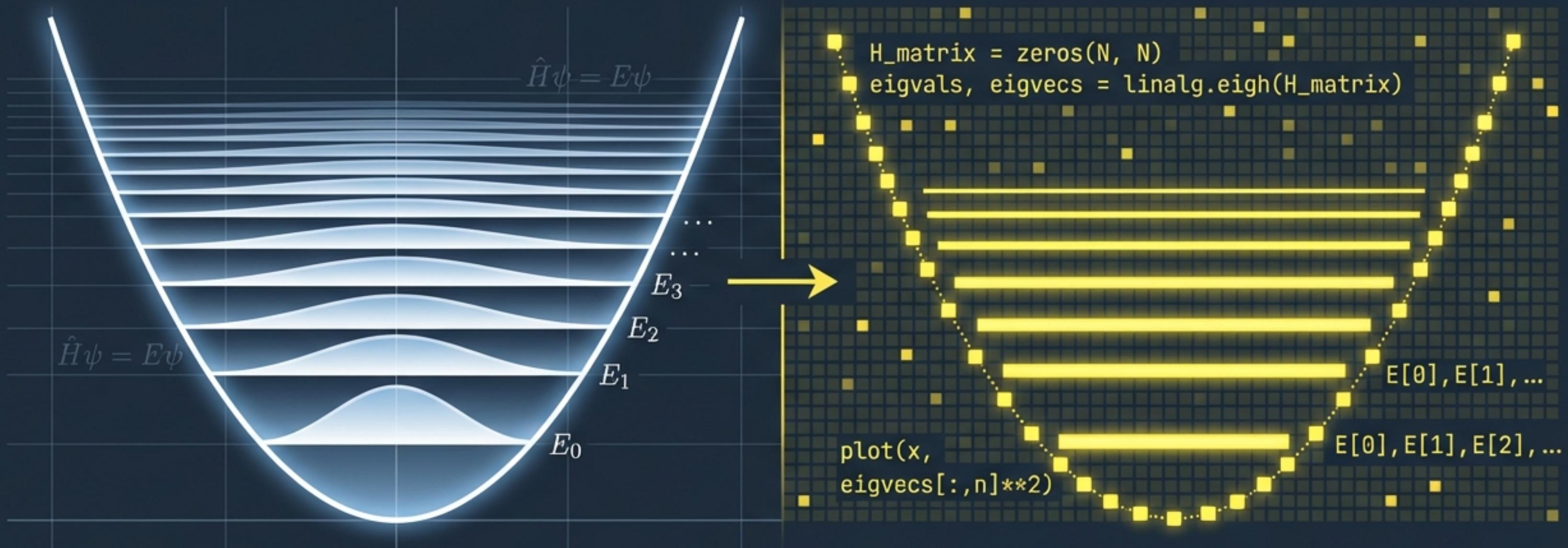


Resolución Numérica del Oscilador Armónico Cuántico

Del enfoque analítico a la diagonalización del Hamiltoniano matricial

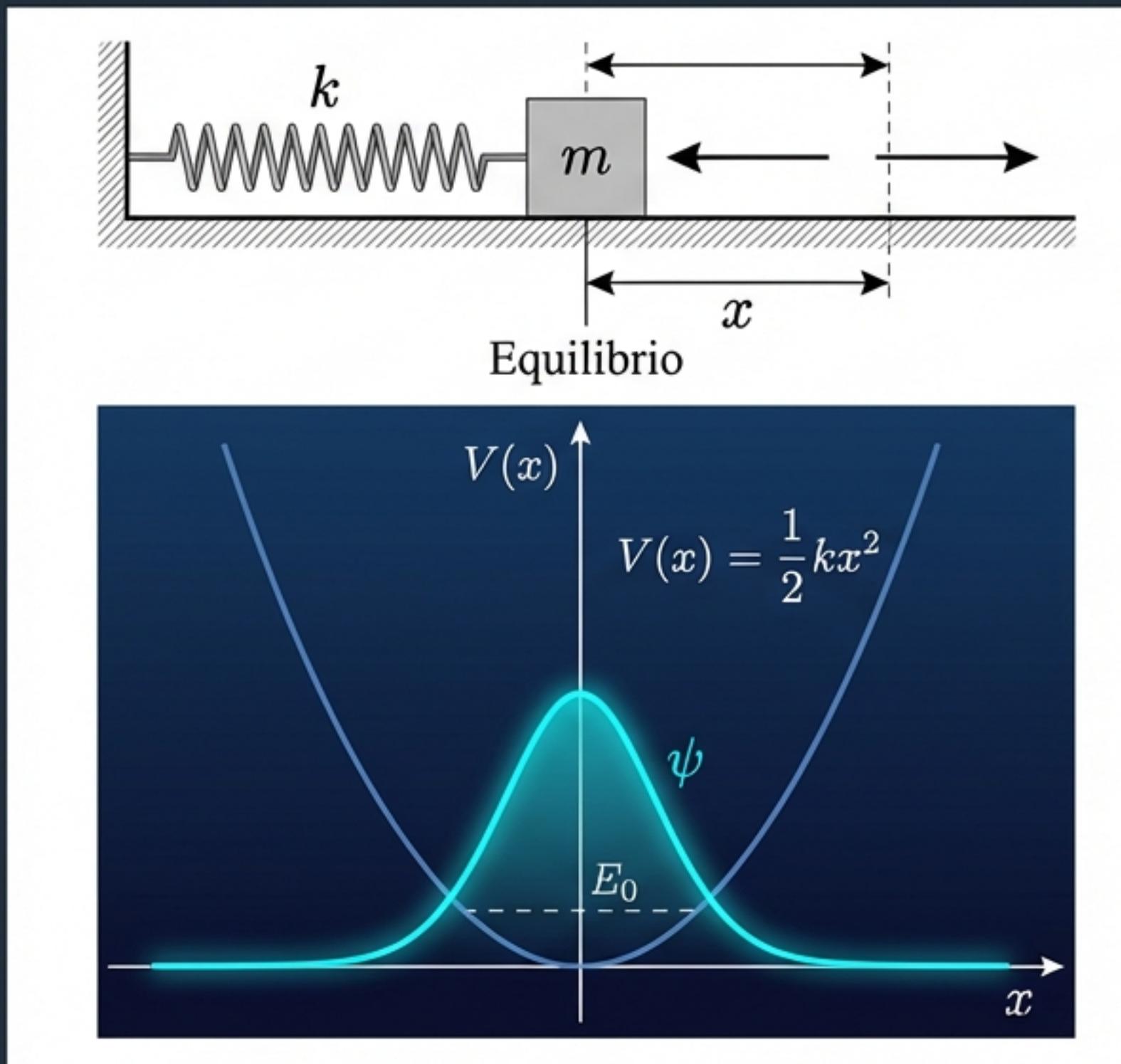


Física Computacional Avanzada | Prof. Cátedra

El puente entre la Ecuación Diferencial y el Álgebra Lineal Computacional

El Sistema Físico: El Oscilador Armónico

Representación Gráfica



Importancia Fundamental:

- Modelo base para vibraciones moleculares.
- Fonones en sólidos y teoría cuántica de campos.

El Potencial:

- $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ (Parábola centrada en el equilibrio).

El Objetivo:

- Resolver la ecuación estacionaria para encontrar los estados permitidos de energía (E) y las funciones de onda (ψ).

¿Por qué este sistema?

- Posee solución analítica exacta.
- Es el 'Gold Standard' para validar algoritmos numéricos.

La Ecuación de Schrödinger Estacionaria

Ecuación con Unidades Físicas:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi = E\psi$$



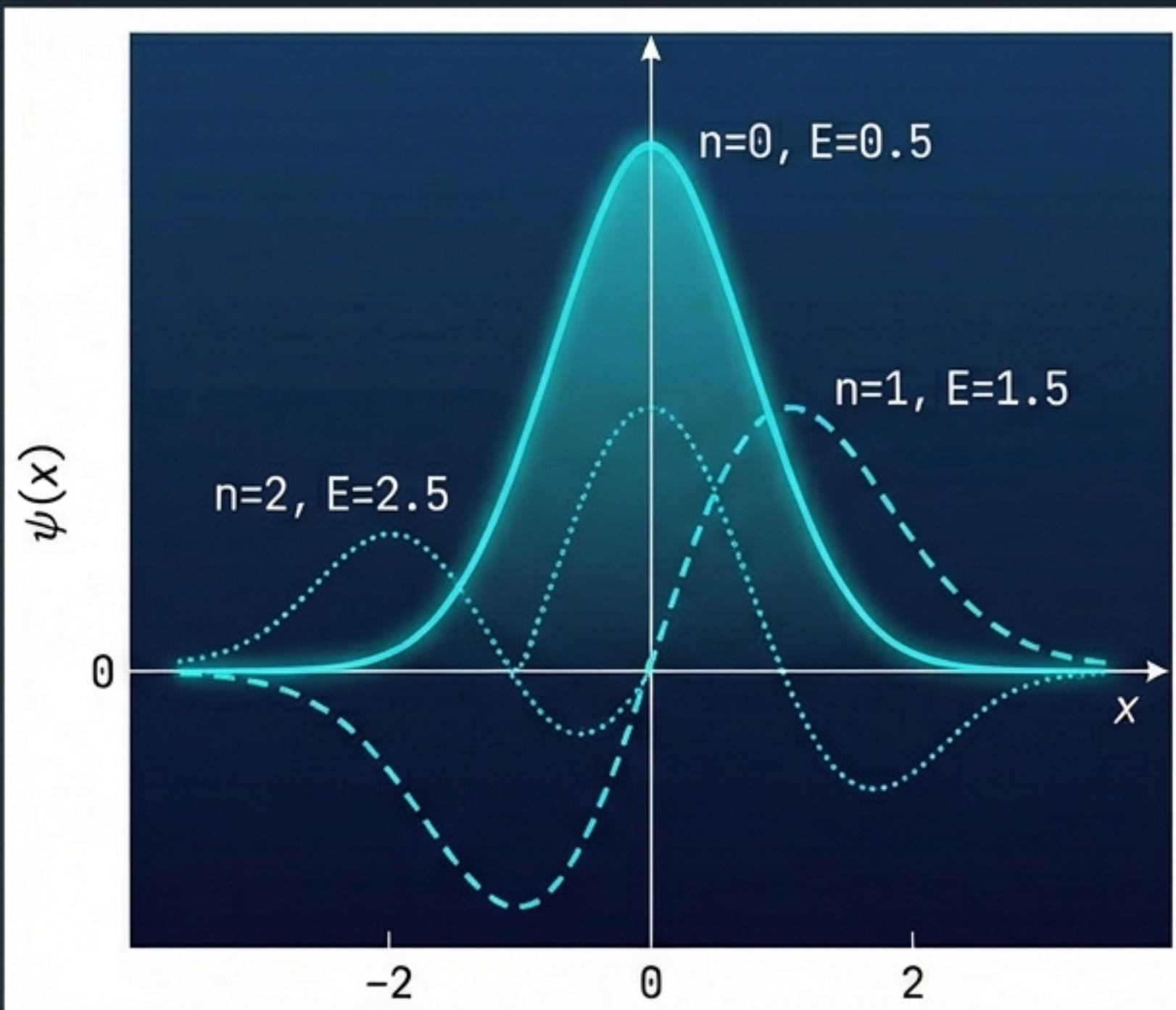
Adimensionalización ($\hbar = m = \omega = 1$)

Ecuación en Unidades Naturales:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}x^2\psi = E\psi$$

Para la computación numérica, trabajamos con variables adimensionales puras, eliminando la complejidad de las constantes físicas.

La Referencia Analítica (Lo que esperamos encontrar)



Solución Exacta Conocida:

Energías Cuantizadas:

- $E_n = n + \frac{1}{2}$ (en unidades naturales)

Funciones de Onda:

- $\psi_n(\xi) = N_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$
- Producto de Polinomios de Hermite (H_n) y una Gaussiana.

Comportamiento Asintótico:

- $\psi \rightarrow 0$ cuando $x \rightarrow \pm\infty$.

El Reto:

- ¿Puede nuestro algoritmo 'descubrir' estos polinomios y energías sin conocer la fórmula?

Estrategia Numérica: Discretización del Espacio



La Caja Finita:

- Dominio restringido:
[R_{min}, R_{max}]

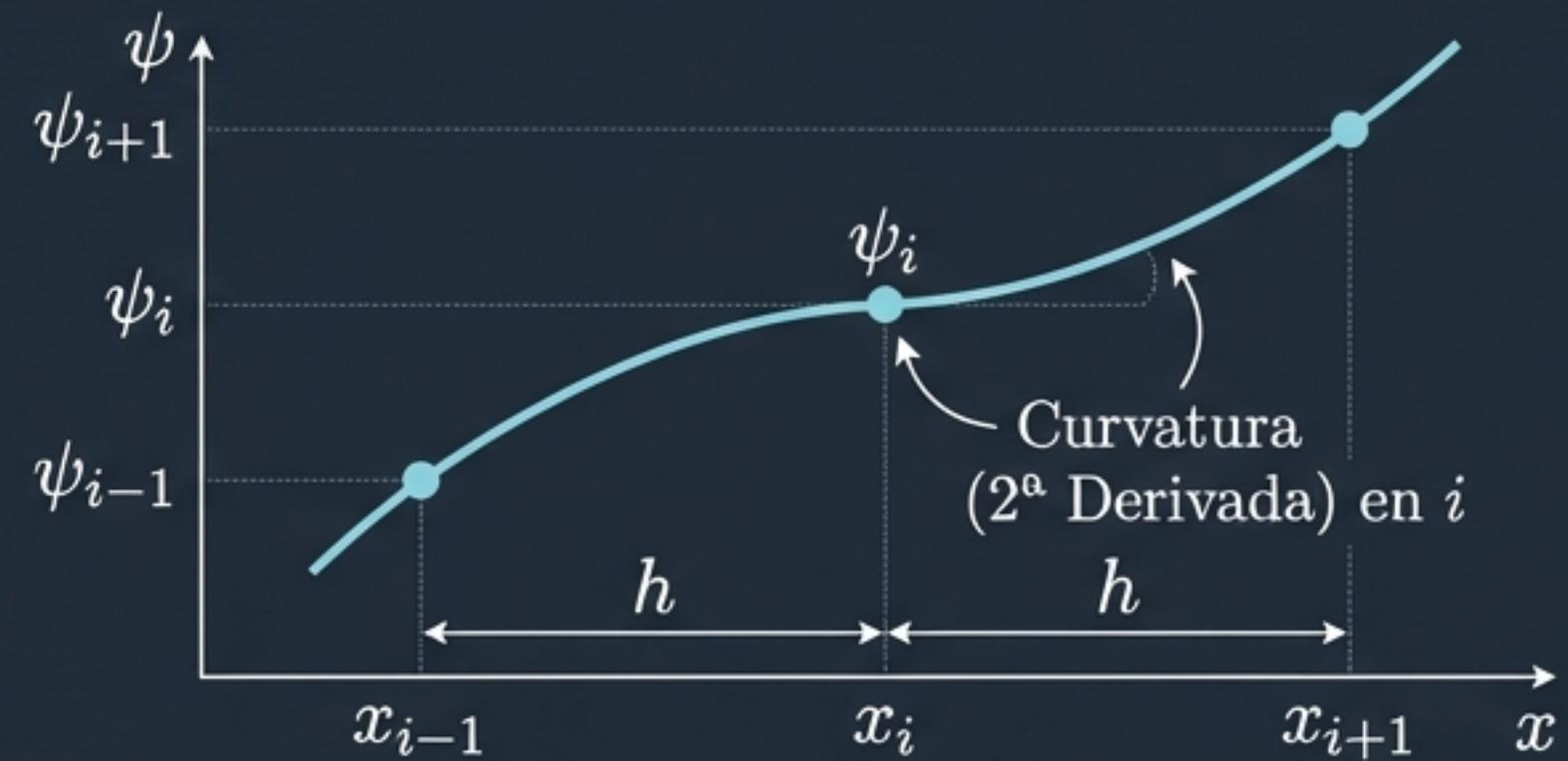
La Malla (Grid):

- N puntos discretos.
- Paso de malla:
$$h = \frac{R_{max} - R_{min}}{N}$$

Consecuencia:

- La función $\psi(x)$ pasa de ser una curva a un vector:
$$\vec{\psi} = [\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N]^T$$

Método de Diferencias Finitas



Aproximación de la Energía Cinética (Segunda Derivada):

$$\left. \frac{d^2\psi}{dx^2} \right|_i \approx \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{h^2}$$

Significado:

- Conecta el valor en i con sus vecinos inmediatos.
- Transforma el operador diferencial en una operación algebraica.
- Error de truncamiento: $O(h^2)$.

Construcción del Hamiltoniano Matricial

Ecuación Discretizada:

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{h^2} \right) + \frac{1}{2} x_i^2 \psi_i = E \psi_i$$

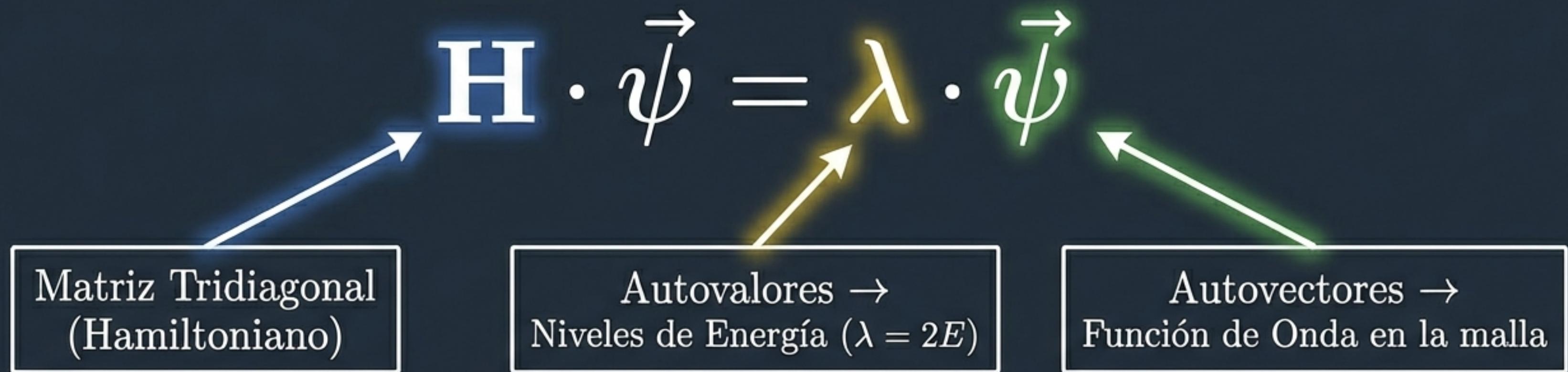
Elementos de la Matriz (Multiplicando por 2):

- Diagonal (d_i): $\frac{2}{h^2} + x_i^2$
- Fuera de la diagonal (e_i): $-\frac{1}{h^2}$

$$\begin{bmatrix} d_1 & e_1 & 0 & 0 & \dots \\ e_2 & d_2 & e_2 & 0 & \dots \\ 0 & e_3 & d_3 & e_3 & \dots \end{bmatrix}$$

Matriz Tridiagonal Simétrica

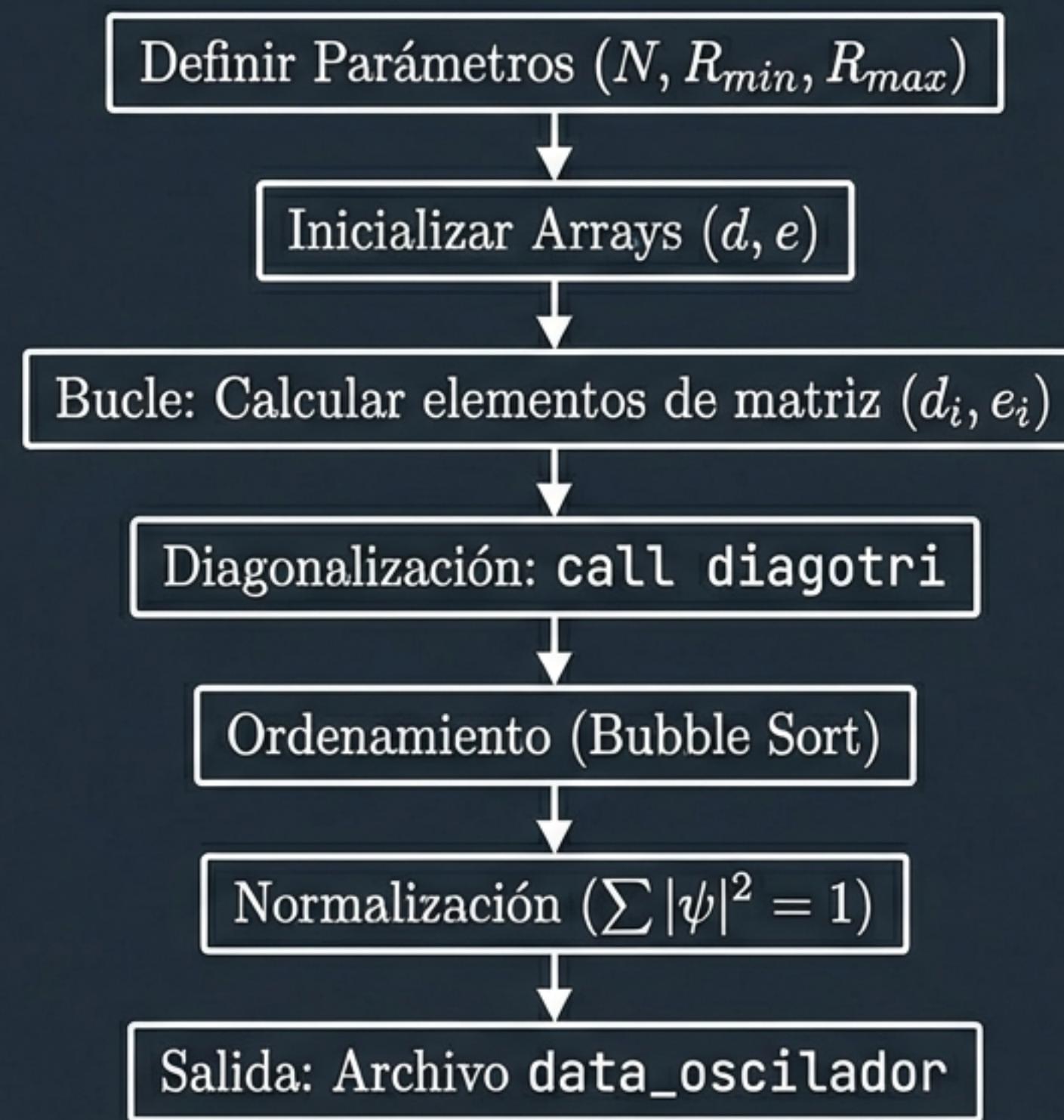
El Problema de Autovalores



Interpretación Física:

- Resolver el sistema lineal nos entrega *simultáneamente* todas las energías posibles y sus funciones de onda asociadas.

Algoritmo Computacional (Implementación)



Del Papel al Código: Llenado de la Matriz

Teoría

$$d_i = \frac{2}{h^2} + x_i^2$$

$$e_i = -\frac{1}{h^2}$$

Fortran (Source 3)

```
h = (Rmax - Rmin) / N
h_2 = 1.d0 / h**2

do i = 1, N
    xi = Rmin + i*h
    d(i) = 2.d0*h_2 + xi*xi
    e(i) = -h_2
end do
```

Traducción literal de la ecuación discretizada a la sintaxis del bucle.

Diagonalización y Ordenamiento

El Motor Numérico: Diagonalización

```
call diagotri(d, e, N, A, .true.)
```

Transforma la matriz tridiagonal para extraer autovalores (d) y autovectores (A).

Ordenamiento (Método de Burbuja)

```
do i=1,N
    do j=i+1,N
        if(d(j).lt.d(i)) then
            ! Intercambio de energías y vectores
            xi=d(i); d(i)=d(j); d(j)=xi
            tem(:)=A(:,i); A(:,i)=A(:,j); A(:,j)=tem(:)
        end if
    end do
end do
```

Ordena los estados de menor a mayor energía: Base → Excitados.

Normalización de la Función de Onda

Condición Física:

La probabilidad total debe ser 1.

$$\int |\psi|^2 dx \approx \sum_{i=1}^N |\psi_i|^2 \cdot h = 1$$

Implementación:

```
tem = 0.d0
do i = 1, N
    tem(:) = tem(:) + A(i,:)**2
end do
tem = h * tem ! Factor de escala
! Guardado normalizado
! A(i,...)**2 / tem(i)
```

Sin esto, los vectores son solo números; con esto, son densidad de probabilidad.

Resultados Numéricos: Convergencia

Nivel (n)	Teórico ($n + 0.5$)	Numérico ($N = 50$)	Numérico ($N = 1000$)
0	0.500	0.498	0.500
1	1.500	1.492	1.500
2	2.500	2.485	2.500

Observación:

- Los autovalores del código (λ) se dividen por 2 para obtener la energía (E).

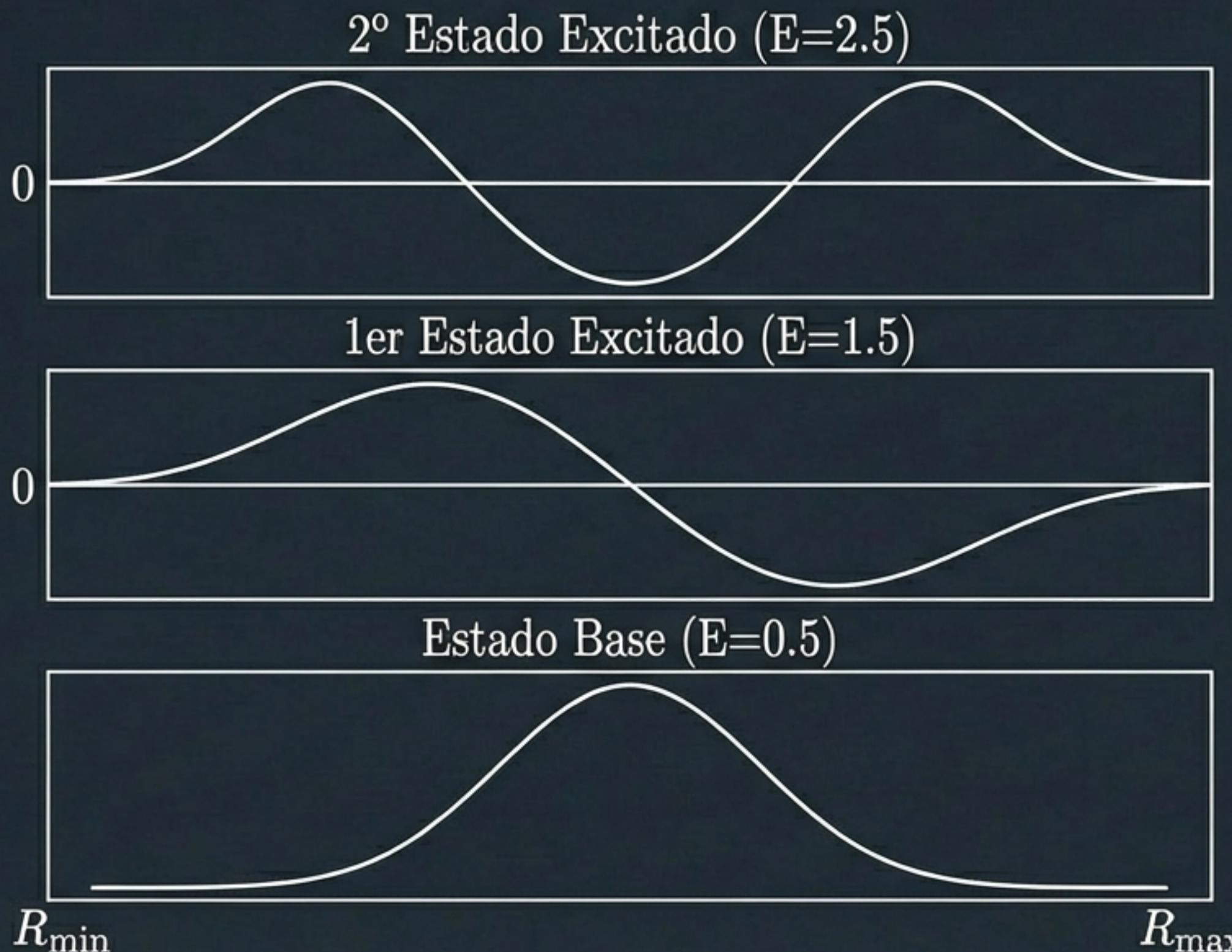
$0.5d0 * d(1:6)$

- Al aumentar la resolución de la malla (N), el error numérico desaparece.

Conclusión:

- La cuantización emerge naturalmente de la matriz.

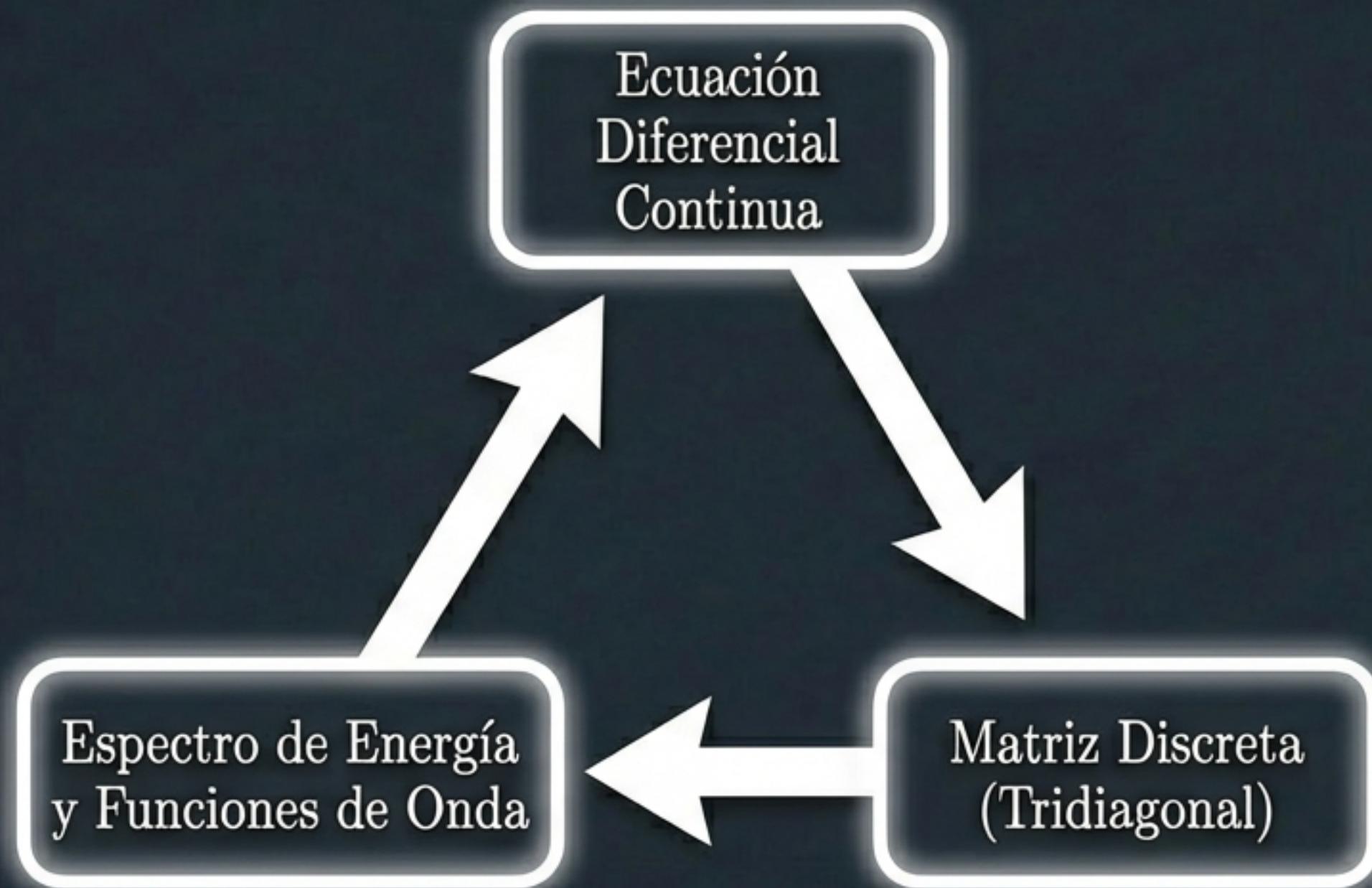
Interpretación de los Autovectores



Conexión Física:

- El número de nodos (ceros) corresponde exactamente al número cuántico n .
- El código dibuja la forma correcta de la materia a nivel cuántico.

Conclusiones: El Poder de la Diagonalización



- Transformación Exitosa: De cálculo continuo a álgebra lineal discreta.
- Precisión: Controlada por la densidad de malla (N) y tamaño de caja.
- Universalidad: Este método resuelve cualquier potencial 1D, incluso sin solución analítica.

“ La computadora no ‘sabe’ física, pero las matrices contienen toda la información del sistema cuántico. ”