Física Computacional

Escuela de Física

M.R.Fulla[1]

[1]Escuela de Física, Universidad Nacional de Colombia Sede Medellín

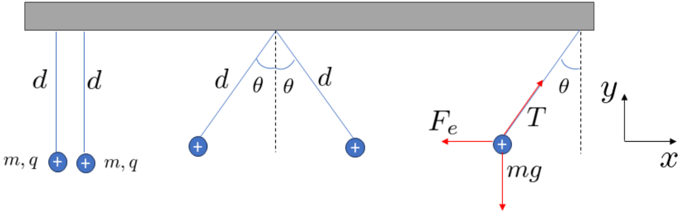
marlonfulla@yahoo.com- Oficina:21-420/20-418

https://sites.google.com/view/fiscomunalmed/

September 28, 2023

Solución de ecuaciones $f(x) = 0$

Determinar el ángulo de equilibrio:



Ley de Coulomb

$$F_e = \frac{k_c q_1 q_2}{r^2}$$

$$\sum F_x = T sen\theta - \frac{k_c q^2}{d^2 sen^2\theta} = 0 \quad (1)$$

$$\sum F_y = T cos\theta - mg = 0 \quad (2)$$

$$(1)/(2) \rightarrow tan\theta = \frac{k_c q^2}{mgd^2 sen^2\theta}$$

$$f(\theta) = tan\theta - \frac{k_c q^2}{mgd^2 sen^2\theta} = 0$$

Solución de ecuaciones $f(x) = 0$

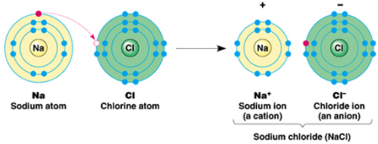
- $x \,/\, f(x) = 0$: Raíces de $f(x)$
- $f(x)$: Explícita o Implícita

Ejemplos:

- Puntos de equilibrio
- Cálculo de niveles cuánticos
- Superficies equipotenciales de un campo
- Cálculo de máximos y mínimos (Optimización) de $g(x)$ donde $g'(x) = f(x) = 0$

Solución de ecuaciones $f(x) = 0$

Molécula Diatómica NaCl



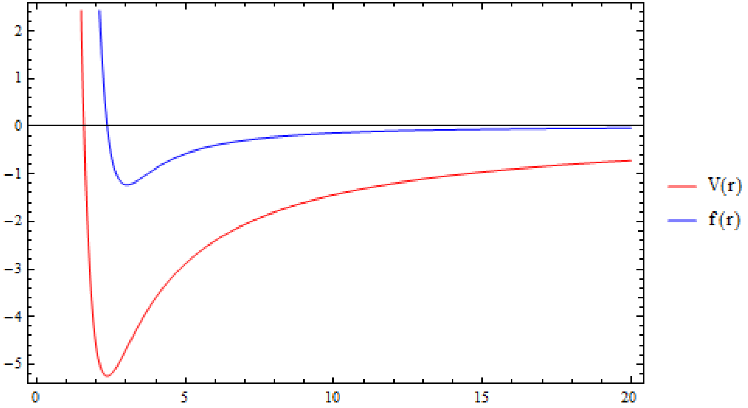
$V(r) = -\frac{e^2}{r} + \alpha e^{-r/\rho}$: Potencial de interacción iónico

$\alpha,\ \rho$: Parámetros de interacción efectiva

$\alpha = 1.09 \times 10^3 eV$ (Kittel,1986), $\rho = 0.330$ Å, $e^2 = 14.4$ ÅeV

Solución de ecuaciones $f(x) = 0$

Potencial Diatómico NaCl



Solución de ecuaciones $f(x) = 0$

En equilibrio, la fuerza entre iones es:

$$f(r) = -\frac{dV(r)}{dr} = -\frac{e^2}{r^2} + \frac{\alpha}{\rho} e^{-r/\rho}$$

se define la longitud de equilibrio como r_{equ} tal que $V(r_{equ}) = V_{min}$ ó $f(r_{equ}) = 0$

$r_{equ} = 2.36$ Å

Solución de ecuaciones $f(x) = 0$

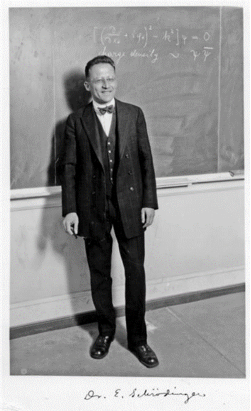
Ondas Cuánticas

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

- Mecánica Cuántica $\rightarrow$ Sistemas físicos $\sim\ 10^{-9}\ m$ (escala atómica).
- En condiciones estacionarias:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Ecuación de Schrödinger



Back of photograph: Professor E. Schrödinger, Dec 1926

Solución de ecuaciones $f(x) = 0$

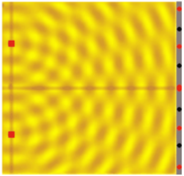
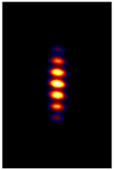
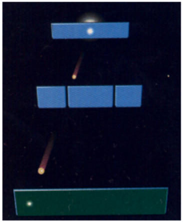
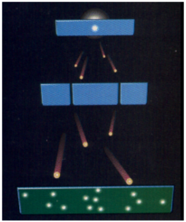
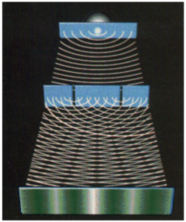
- $\psi(x)$: función de onda (en general una cantidad compleja)
- $\mathbb{P} = \psi(x)\psi^*(x) = |\psi(x)|^2$: densidad de probabilidad

Max Born

Cuando la partícula está ligada a través de un potencial $\rightarrow$ confinada en una región del espacio.

$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \, dx = 1$: **condición de normalización**

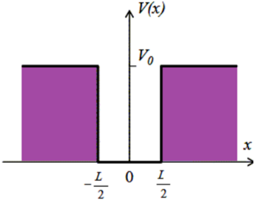
Solución de ecuaciones $f(x) = 0$

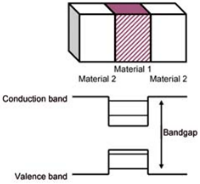







$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$: **Principio de Incertidumbre de Heisenberg**

Solución de ecuaciones $f(x) = 0$

Ejemplo: Pozo de Potencial





$$\hat{H}\psi(x) - E\psi(x) = \begin{cases} x < -\frac{L}{2} & \frac{d^2}{dx^2}\psi(x) - \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\psi(x) = 0 \\ -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} & \frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x) = 0 \\ x > \frac{L}{2} & \frac{d^2}{dx^2}\psi(x) - \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\psi(x) = 0 \end{cases}$$

Solución de ecuaciones $f(x) = 0$

Definiendo a $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ y $k' = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$

$$\psi(x) = \begin{cases} x < -\frac{L}{2} & \psi(x) = c_1 e^{k'x} + c_1' e^{-k'x} \\ -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} & \psi(x) = c_2 coskx + c_2' sinkx \\ x > \frac{L}{2} & \psi(x) = c_3 e^{-k'x} + c_3' e^{k'x} \end{cases}$$

- $c_1' = c_3' = 0$:función de onda bien comportada
- soluciones pares e impares en el pozo
- necesitamos garantizar continuidad y diferenciabilidad

Solución de ecuaciones $f(x) = 0$

Continuidad y diferenciabilidad en $x = \frac{L}{2}$ (solución par)

$$c_2 cos(k\frac{L}{2}) = \quad c_3 e^{-k'\frac{L}{2}} \quad : \quad \text{continuidad (1)}$$

$$-c_2 k sin(k\frac{L}{2}) = -c_3 k' e^{-k\frac{L}{2}} \quad : \text{diferenciabilidad (2)}$$

Ahora (2)/(1)

$$k \; tan(k\frac{L}{2}) - k' = 0$$

$$f(E) = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \; tan(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\frac{L}{2}) - \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} = 0$$

Solución de ecuaciones $f(x) = 0$

Continuidad y diferenciabilidad en $x = \frac{L}{2}$ (solución impar)

$c_2 sin(k\frac{L}{2})= \quad c_3 e^{-k'\frac{L}{2}} \quad : \quad$ continuidad (3)

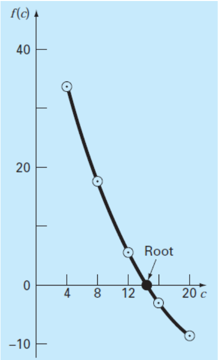
$c_2 k cos(k\frac{L}{2}) = -c_3 k' e^{-k\frac{L}{2}} \quad$: diferenciabilidad (4)

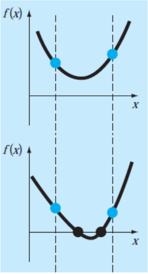
Ahora (4)/(3)

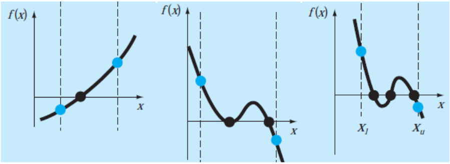
$$k\ cot(k\frac{L}{2}) + k' = 0$$

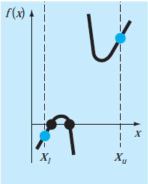
$$f(E) = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\ cot(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\frac{L}{2}) + \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}} = 0$$

Método de la Bisección









Método de la Bisección

Pasos:

1. Seleccionar valores x_i y x_d de tal forma que la función presente un cambio de signo ($f(x_i)f(x_d) < 0$).
2. un estimativo de la raíz es $x_r = (x_i + x_d)/2$
3. Realizar las siguientes evaluaciones para determinar en cual subintervalo yace la raíz:
   3.1 si $f(x_i)f(x_r) < 0$, la raíz yace en el intervalo $[x_i, x_r]$, luego haga $x_d = x_r$ y repita el paso 2.
   3.2 si $f(x_i)f(x_r) > 0$, la raíz yace en el intervalo $[x_r, x_d]$, luego haga $x_i = x_r$ y repita el paso 2.
   3.3 si $f(x_i)f(x_r) = 0$, la raíz es igual a x_r, por lo tanto se termina el cálculo.

Actividad y Tarea

Escribir un algoritmo y un programa en FORTRAN para realizar un procedimiento de Bisección y utilizarlo para calcular la longitud de equilibrio de una molécula de NaCl.