

3. Partículas sometidas a fuerzas conservativas: Teoría ondulatoria de Schrödinger

0. Introducción

1. Partícula cuántica en un potencial: ec de Schrödinger(1926)

2. Algunos problemas en 1D: Partícula libre.

3. Escalón de potencial.

4. Pozo cuadrado de potencial de paredes infinitas, en 1D

5. Barrera de potencial en 1D. Efecto “túnel”.

6. Pozo cuadrado de potencial de profundidad finita.

7. La relación de incertidumbre.

8. Solución numérica de la ec. de Schrödinger

Ejemplo1: pozo cuadrado de potencial

Ejemplo 2: oscilador armónico.

0. Introducción

En este capítulo estudiamos la primera teoría cuántica verdaderamente consistente y completa que marca la ruptura con el mundo clásico.

Se puede decir que los desarrollos posteriores no hacen más que extender el rango de aplicación de la teoría sin añadir demasiados conceptos verdaderamente nuevos.

Por otro lado también la Mecánica Clásica se puede considerar no como otra cosa sino como un caso límite de la cuántica

E. Schrödinger (mec. ondulatoria) y W. Heisenberg (mec. matricial) se propusieron (1926) encontrar una forma de tratar el movimiento de una partícula cuántica sometida a fuerzas conservativas (no conservativas no aparecen nunca a escala atómica o sub-atómica) que derivan de un potencial V .

Al cabo de menos de un año Schrödinger mostró que eran matemáticamente equivalentes. Por eso sólo vamos a estudiar el tratamiento o “representación” de Schrödinger

1. Ec. De Schrödinger (1926) I

Reproducimos los puntos clave del artículo de Schrödinger (*Annalen der Physik* 4, 79 (1926) de 40 páginas

* Sch. retomó (al parecer ya enunciada por Hamilton y mencionada por de Broglie) la analogía óptica geométrica/mecánica clásica:

Principio de Fermat (mínimo camino óptico) \Leftrightarrow principio de mínima acción de Hamilton.

* Consideró que probablemente así como el principio de Fermat es un caso límite del principio de Huyghens cuando la longitud de onda es muy pequeña, las leyes de la Mecánica Clásica podrían ser un caso límite para partículas de “gran” masa en que la longitud de onda de de Broglie es muy pequeña.

Los fotones cambian de velocidad y de longitud de onda al pasar de un medio a otro de diferente índice de refracción.

Las partículas clásicas cambian de velocidad cuando cambia la energía potencial pues se cumple:

$$\frac{1}{2}mv^2 + V(\mathbf{r}) = E = cte$$

Ec. De Schrödinger (1926) II

Recordemos la ec fundamental de ondas que cumple una **partícula libre** en 1D:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \quad (1)$$

Consideremos una onda “monocromática”
(como veremos, es **de energía definida**)

$$\Psi(x,t) = \varphi(x)e^{-i\omega t}$$

Pues cualquier función de x y t se puede escribir como superposición de funciones de esa forma

Si la sustituimos en (1) nos queda: $\varphi''(x) + \frac{2m\omega}{\hbar} \varphi(x) = 0$

Llamando: $k = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}$ $\varphi''(x) + k^2 \varphi(x) = 0 \quad (2)$

Cuya solución más general posible es : $\varphi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

O sea: es una superposición de dos ondas armónicas de número de ondas k , y $-k$,
es decir que el coeficiente de φ en (2) representa el cuadrado del número de ondas.

Cuando **hay una energía potencial** $V(x)$ la conservación de la energía clásica exige que: $p^2 = 2m[E - V(x)]$

Aceptando la hipótesis de de Broglie: $p = \hbar k \Rightarrow k(x)^2 = \frac{1}{\hbar^2} 2m[E - V(x)]$

Y sustituyendo en (2) queda: $\varphi''(x) + \frac{1}{\hbar^2} 2m[E - V(x)]\varphi(x) = 0$

Ec de Schrödinger “independiente del tiempo”.

Ec. De Schrödinger (1926) III

La ec de Schrödinger “independiente del tiempo” se suele escribir como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + V(x)\varphi = E\varphi \quad (3)$$

Esta ecuación debe cumplirla la parte espacial φ de cualquier función de onda que represente un estado de la partícula con energía definida E .

Si aceptamos la relación de Planck-Einstein $E = \hbar\omega$

La función de onda completa es $\Psi(x, t) = \varphi(x)e^{-i\omega t} = \varphi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ (4)

Y la ecuación que debe cumplir la función completa:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (5)$$

Ecuación de Schrödinger (dependiente del tiempo) en 1D

Es la ecuación más importante de la Mecánica Cuántica.

Dado que es lineal, cualquier combinación de funciones de la forma (4) cumple esta ecuación, es decir cualquier función que pueda representar el estado de la partícula

En cambio sólo funciones que corresponden a estados de energía bien definida cumplen (3).

Ec. De Schrödinger en 3D

Sin dar detalles (se puede seguir el mismo razonamiento con pequeñas complicaciones adicionales), la ec. (5) se generaliza en 3D a:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(x, y, z, t) + V(x, y, z) \Psi(x, y, z, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, z, t)}{\partial t} \quad (6)$$

El argumento seguido antes se puede seguir en sentido contrario:

Por el teorema de Fourier (o separación de variables), cualquier función de cuadrado integrable es una combinación lineal de otras de la forma:

$$\Psi(x, y, z, t) = \varphi(x, y, z) e^{-i\omega t} \equiv \varphi(x, y, z) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$$

Si le exigimos que cumpla (6) se tiene:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi(x, y, z) + V(x, y, z) \varphi(x, y, z) = E \varphi(x, y, z) \quad (7)$$

Ecuación de Schrödinger “independiente del tiempo” en 3D

Reagrupando se escribe como $\nabla^2 \varphi(x, y, z) + \frac{2m[E - V(x, y, z)]}{\hbar^2} \varphi(x, y, z) = 0$

Por lo que es una “onda” con $k^2 = |\mathbf{k}|^2 = \frac{1}{\hbar^2} 2m[E - V(x, y, z)]$

Si aceptamos la hipótesis de de Broglie $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \Rightarrow p^2 = 2m[E - V(x, y, z)]$

Por tanto $\frac{p^2}{2m} + V = E = \hbar \omega$ y E es pues la energía y está bien determinada

Estrategia general de solución de problemas

El problema general de MQ se puede enunciar como sigue:

Una partícula está sometida a fuerzas que derivan de un potencial conocido $V(\mathbf{r})$.

En $t=0$ (o en un instante dado cualquiera t_0) se encuentra en un estado descrito por la función de onda $\Psi(\mathbf{r},0)$.

Se trata de encontrar $\Psi(\mathbf{r},t)$ en cualquier otro instante.

La estrategia más frecuente es:

1) Encontrar todas las funciones de onda $\varphi_n(\mathbf{r})$ que satisfacen la ec. de Schrödinger independiente del tiempo y las energías E_n correspondientes.

2) Escribir $\Psi(\mathbf{r},0)$ como combinación lineal de las $\varphi_n(\mathbf{r})$ (*veremos pronto que esto es siempre posible y bastante simple*) es decir, encontrar los coeficientes c_n tales

que:

$$\Psi(\mathbf{r},t=0) = \sum_n c_n \varphi_n(\mathbf{r})$$

Entonces la solución al problema es :

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \sum_n c_n \varphi_n(\mathbf{r}) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}$$

El paso más difícil es el 1)

Evolución temporal de las funciones de onda

Una idea importante es que todas las funciones de onda que se obtienen a partir de una dada $\Psi(x,t)$ multiplicándola por un factor de fase global representan el mismo estado físico de la partícula.

En efecto si multiplicamos $\Psi(x,t)$ por $e^{i\alpha}$ ($\alpha = \text{cte real}$) la densidad de probabilidad, y todos los valores esperados de magnitudes físicas son los mismos.

Así pues, los estados de energía definida, con uno sólo de los valores E_n “son estacionarios”, es decir que no evolucionan con el tiempo, pues la función de onda cambia simplemente multiplicada por el factor de fase global $\exp(-iE_n t/\hbar)$

Incluso un estado que es combinación lineal de varios con la misma energía definida E_n (pero otras propiedades diferentes), es estacionario, debido a que su función de onda es la inicial multiplicada por $\exp(-iE_n t/\hbar)$.

En cambio, cualquier otra función de onda, que sea combinación de estados con varios E_n distintos, cada función φ_n va multiplicada por un factor de fase distinto.

Físicamente los valores medios, etc... cambian con el tiempo: en resumen un estado que no es de energía definida no es estacionario.

2) Algunos problemas: partícula libre 1D

No hay nada nuevo que decir. La ec de Sch. indepte de t ya vista es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} = E \varphi(x)$$

Que tiene solución para cualquier $E > 0$ (¿por qué no $E < 0$?). Si llamamos $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

La solución más general para cualquier $E > 0$ dado es: $\varphi_k(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

Y la función de onda completa que corresponde a una energía E

$$\Psi(x, t) = \varphi_k(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = Ae^{i(kx - \omega t)} + Be^{-i(kx + \omega t)}$$

Que es una superposición de dos ondas de frecuencia $\omega = \frac{E}{\hbar}$ y número de ondas $k = \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, que se propagan en sentidos opuestos, es decir, la predicción de de Broglie

El estado más general posible de la partícula es una superposición de funciones de onda con todas las k posibles, es decir un paquete de ondas:

$$\Psi(x, t) = \int_{k=-\infty}^{\infty} g(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk$$

3) Escalón de potencial 1D

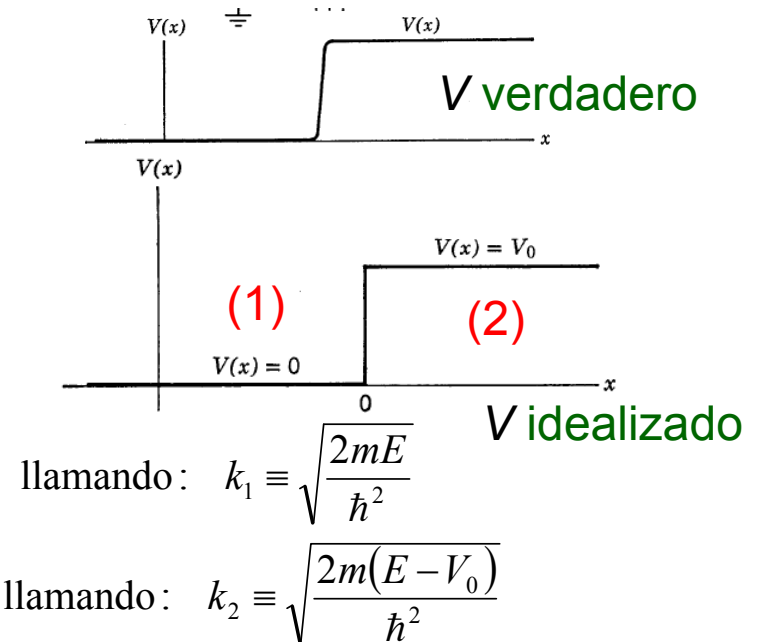
Se tiene:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{si } x < 0, \text{ región(1)} \\ V_0 = \text{const}, & \text{si } x > 0, \text{ región (2)} \end{cases}$$

Ec de Schrödinger:

$$(1) \quad \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{1}{\hbar^2} 2mE\varphi(x) = 0 \Leftrightarrow \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + k_1^2\varphi(x) = 0$$

$$(2) \quad \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{1}{\hbar^2} 2m[E - V_0]\varphi(x) = 0 \Leftrightarrow \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + k_2^2\varphi(x) = 0$$



Solución más general posible :

a) Si $0 < E < V_0$ (energía total menor que la altura del escalón)

definimos el n° real: $c_2 \equiv ik_2 \equiv i\sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$ (2) $\frac{d^2\varphi_2(x)}{dx^2} = c_2^2\varphi_2(x) \Rightarrow \varphi_2(x) = A_2e^{-c_2x} + B_2e^{c_2x}$

El 2º término no es de cuadrado integrable, pues se va a ∞ cuando $x \rightarrow \infty$, así que $B_2 = 0$

En la región (1), la solución más general posible es:

$$(1) \quad \frac{d^2\varphi_1(x)}{dx^2} = -k_1^2\varphi_1(x) \Rightarrow \varphi_1(x) = A_1e^{ik_1x} + B_1e^{-ik_1x}$$

Condiciones de frontera I

Se mostrará más tarde que φ y φ' deben ser continuas en el escalón ($x=0$):

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0) \Leftrightarrow A_1 + B_1 = A_2$$

$$\varphi'_1(0) = \varphi'_2(0) \Leftrightarrow ik_1(A_1 - B_1) = -c_2 A_2$$

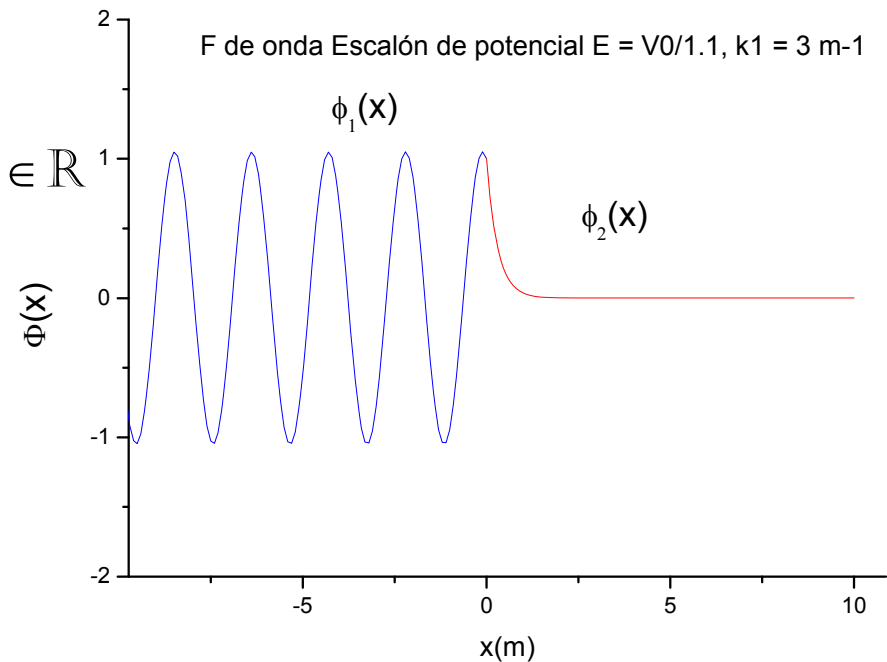
A_2 se puede elegir real (se puede multiplicar todo por un insignificante factor de fase constante $e^{i\alpha}$ hasta que lo sea) entonces resulta que:

$$A_1 = \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{c_2}{k_1} \right) A_2 = \frac{1}{2} \left(1 + i \sqrt{\frac{V_0}{E} - 1} \right) A_2; B_1 = \frac{1}{2} \left(1 - i \frac{c_2}{k_1} \right) A_2 = A_1^*; |B_1| = |A_1|$$

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1^* e^{-ik_1 x} = 2 \operatorname{Re} \left(A_1 e^{ik_1 x} \right) =$$

$$A_2 \left[\cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x\right) - \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}} \sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x\right) \right] \in \mathbb{R}$$

$$\varphi_2(x) = A_2 \exp\left(-\frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} x\right)$$



Función de onda total

Finalmente, la función de onda total que corresponde a una E definida se obtiene multiplicando $\varphi(x)$ por el factor temporal $\exp(-i\omega t) = \exp[-i(E/\hbar) t]$.

Los resultados son totalmente análogos a la reflexión total de una onda EM en un medio conductor con frecuencia menor a la de plasma:

A) La f. de o. en el segundo medio ($E < V_0$) no es nula sino evanescente. Es estacionaria, no se propaga y su amplitud decrece exponencialmente al penetrar en él.

B) La f. de o. en el primer medio es una superposición de dos ondas planas de la misma amplitud, una se propaga hacia la derecha y otra hacia la izquierda. En decir, en realidad es también una onda estacionaria.

C) El factor de reflexión es la unidad: $R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = 1$

D) Función de onda total para energía $E < V_0$

$$\psi(x, t) = \begin{cases} A_2 \left[\cos(k_1 x) - \frac{c_2}{k_1} \sin(k_1 x) \right] e^{-i\frac{E}{\hbar} t} & \text{si } x < 0 \\ A_2 e^{-\left(c_1 x - i\frac{E}{\hbar} t\right)} & \text{si } x > 0 \end{cases}$$

E) Cualquier energía $0 < E < V_0$ es permitida (luego se verá que también cuando $E > V_0$)

Escalón de altura infinita

Si el escalón de potencial es de altura infinita ($E \ll V_0$) la analogía es con la reflexión total de las ondas EM en un conductor perfecto. En ese caso:

$$c_2 = ik_2 = i\sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}; |c_2| \gg k_1; A_2 = i\frac{k_1}{c_2}(A_1 - B_1) = 0$$

La onda evanescente se anula (de amplitud despreciable frente a las del 1er medio)

$$\text{Además: } A_1 + B_1 = A_2 \cong 0 \Rightarrow A_1 = -B_1$$

La función de ondas total se anula en la interfase:

$$\psi(x=0, t) = (A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = (A_1 + B_1) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = 0$$

En otros puntos x , $\Psi(x, t)$ corresponde a una onda estacionaria con un nodo en la interfase:

$$\psi(x, t) = (A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = 2iA_1 \sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Escalón de potencial 1D. Caso b) $E > V_0$

Con las mismas definiciones de: $k_1 \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ $k_2 \equiv \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} \in \mathbb{R}$

Tenemos: (1) $\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + k_1^2\varphi(x) = 0$; (2) $\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + k_2^2\varphi(x) = 0$

Y la solución general con E dada es: $\varphi_1(x) = A_1e^{ik_1x} + B_1e^{-ik_1x}$; $\varphi_2(x) = A_2e^{ik_1x} + B_2e^{-ik_1x}$

Es interesante estudiar el caso particular en que no hay onda incidente por la derecha, es decir cuando $B_2 = 0$.

Como antes, sin pérdida de generalidad se puede elegir que A_2 sea real

$$\varphi_1(x) = A_1e^{ik_1x} + B_1e^{-ik_1x}; \varphi_2(x) = A_2e^{ik_1x}$$

Y las condiciones de frontera en $x=0$ imponen: $\varphi_1(0) = \varphi_2(0) \Leftrightarrow A_1 + B_1 = A_2$
 $\varphi_1'(0) = \varphi_2'(0) \Leftrightarrow k_1(A_1 - B_1) = k_2A_2$

Resolviendo en función de A_2 se tiene:

$$A_1 = \frac{1}{2} \frac{k_1 + k_2}{k_1} A_2; B_1 = \frac{1}{2} \frac{k_1 - k_2}{k_1} A_2$$

$$R + T = 1$$

$$R = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 > 0!!!; T = \frac{v_2}{v_1} \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2 = \frac{v_2}{v_1} \left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right)^2 ; T = \frac{k_2}{k_1} \left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right)^2$$

Escalón de potencial 1D. Caso b) $E > V_0$ II

Si $V_0 < 0$ se pueden aplicar las mismas fórmulas pero ahora $k_2 > k_1$.

También en este caso hay una probabilidad no nula de reflexión

Todas estas propiedades ocurren igualmente en la reflexión y refracción de ondas EM. Las ecs que dan R y T se llaman fórmulas de Fresnel en la Óptica Física

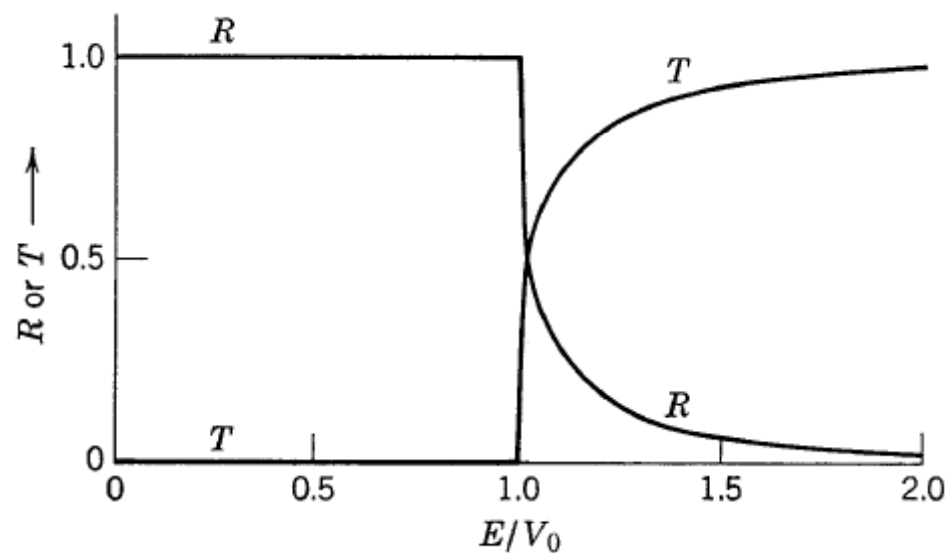
Notar que una **partícula clásica**:

- * se reflejaría con total seguridad si $E < V_0$ (y no tendría acceso a la parte derecha del escalón)
- * y se transmitiría con total seguridad si $E > V_0$.
- * Si $E = V_0$ la partícula clásica se detendría justo en el borde superior del escalón.

Contrariamente, **una partícula cuántica** tiene siempre una probabilidad de reflexión no nula, excepto si $k_2 \gg k_1$ (escalón descendente infinitamente profundo)

Escalón de potencial 1D.

Factores de reflexión y transmisión en función de la energía



Escalón de potencial 1D. Partícula “casi clásica”

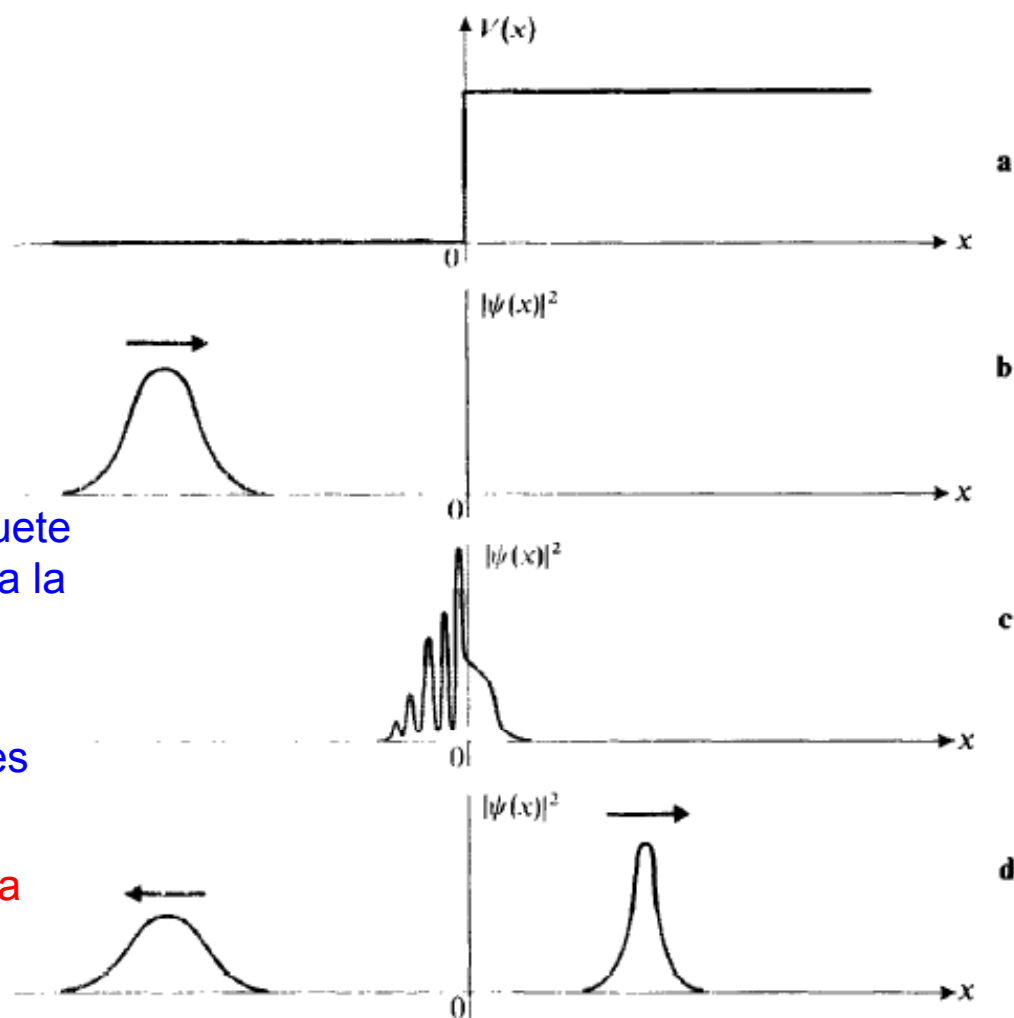
Caso b) $E > V_0$

Una partícula cuyo comportamiento se parezca al clásico viene representada por un paquete de ondas y tiene una energía no perfectamente definida sino que es una superposición de funciones de onda con k distintas

La figura representa la evolución de un paquete (se representa $|\Psi(x,t)|^2$) que se mueve hacia la derecha, con $\langle E \rangle > V_0$.

Después del “choque” con el escalón el paquete se divide en dos partes de integrales proporcionales a R y T respectivamente.

El estado final es una superposición cuántica de “partícula a la izquierda” y “partícula a la derecha”



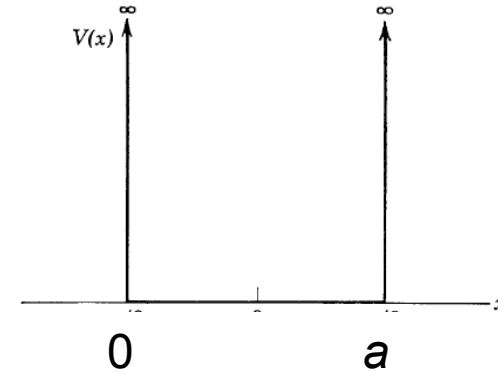
Según la MCL el paquete reflejado no existiría

Según la MQ la partícula puede estar en cualquiera de los dos paquetes, el transmitido o el reflejado, con probabilidades T y R .

4) Pozo infinito de potencial 1D

Se tiene:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{si } 0 < x < a \\ \infty, & \text{si } x > a \text{ ó } x < 0 \end{cases}$$



Ec de Schrödinger:

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{1}{\hbar^2} 2mE \varphi(x) = 0 \Leftrightarrow \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + k^2 \varphi(x) = 0$$

llamando: $k \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

Solución más general posible: $\varphi(x) = A' e^{ikx} + B' e^{-ikx} \equiv A \sin kx + B \cos kx$

Condiciones de contorno.

Como hemos visto antes si $V \rightarrow \infty$, $\varphi=0$ (físicamente: la partícula no puede estar donde la energía potencial es infinita, ya que no podemos llevarla allí ni con todo el trabajo del Universo)

Así pues $\varphi(0)=\varphi(a)=0 \Rightarrow B=0$

Y además $\sin ka = 0 \Rightarrow k = \frac{n\pi}{a}$, $E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$; $n = 1, 2, 3, \dots$

Sustituyendo: $\varphi_n(x) = A \sin \frac{n\pi x}{a}$ $\Psi(x,t) = \varphi_n(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = A \sin \frac{n\pi x}{a} \exp\left(i \frac{\pi^2 n^2}{2ma^2 \hbar} t\right)$

Normalización, exigimos que : $\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n(x)^* \varphi_n(x) dx \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n(x,t)^* \Psi_n(x,t) dx = 1$

$$1 = |A|^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \frac{1}{2} |A|^2 \int_0^a \left[1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)\right] dx = \frac{a}{2} |A|^2$$

Por tanto: $|A|^2 = \frac{2}{a}$

Dentro de esta condición la elección del argumento de A es arbitrario (afecta Ψ en una fase **global** que no tiene importancia física)

Lo más simple es tomar $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$

Finalmente queda:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2; n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

$$\Psi(x, t) = \varphi_n(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \exp\left(i \frac{\pi^2 n^2}{2ma^2 \hbar} t\right)$$

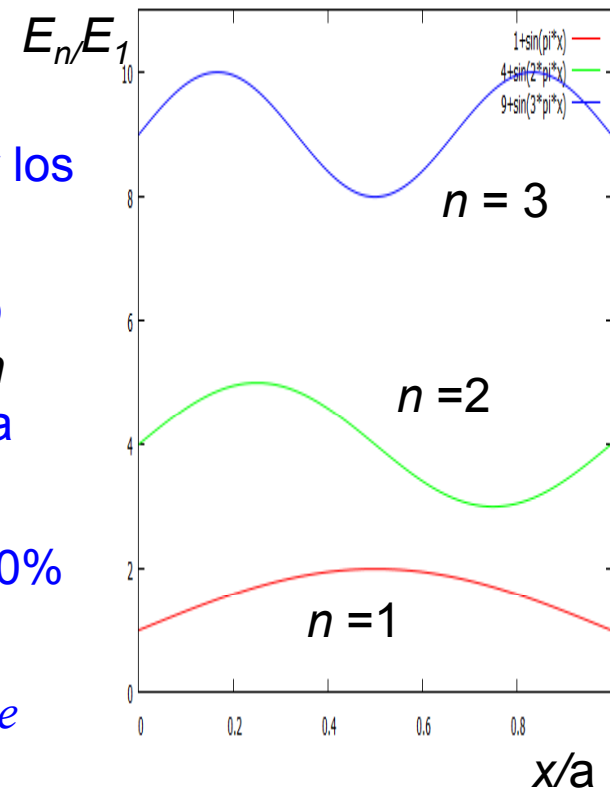
Observar:

a) Las funciones de onda de energía definida son ondas estacionarias. Como en una cuerda fija por los extremos

b) Las energías posibles están cuantificadas: sólo pueden ser los valores que se obtienen dando a n valores enteros positivos: hay una energía mínima con $n = 1$ (estado "fundamental")

c) El momento no está definido sino que hay un 50% de posibilidades de $p = +\hbar k$ y un 50% de $p = -\hbar k$

d) Una partícula cuántica con energía definida E_n no se mueve a un lado y otro rebotando en las paredes: **UN ESTADO DE ENERGÍA DEFINIDA ES ESTACIONARIO y NO EVOLUCIONA**



e) **Espectro discreto de energías**. Este es el primer problema en que las energías posibles no pueden tomar cualquier valor, sino exclusivamente las dadas por la fórmula anterior y es debido **al confinamiento de la partícula** en un espacio limitado, similarmente a las ondas estacionarias en una cuerda tensa.

Se dice que **el espectro de energías es “DISCRETO”**.

f) En este caso y para cualquier partícula confinada, el estado de mínima energía o **“fundamental”** no puede ser de energía cero, pues en ese caso sería $p = 0$, $\Delta p = 0$ y como mucho $\Delta x = a$, por lo que no se cumpliría la relación de incertidumbre.

g) Observar que la función de ondas φ_n tiene exactamente n “vientres” y $n+1$ nodos (como una onda estacionaria en una cuerda). Es decir $n-1$ **nodos interiores donde la f.de o. se anula**.

Esta es una característica de las f. de o. en 1D, de energía definida que corresponden a una partícula confinada, con cualquier potencial. Los nodos de los extremos no se cuentan (**aquí salen porque $V(0)=V(a) = \infty$**) y pueden no existir si la f.de. o. se va exponencialmente a cero en $x \rightarrow \pm\infty$

h) Es interesante **estimar** (no es un cálculo riguroso) **la energía del nivel fundamental** suponiendo que $\Delta x = a$ y que $\Delta x \Delta p = \hbar/2$ (mínima incertidumbre posible)

Para una energía E_1 (exclusivamente cinética) $E_1 = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow p = \pm \sqrt{2mE_1}$

$$\langle p \rangle = \frac{1}{2} p + \frac{1}{2} (-p) = 0$$

$$\Delta p^2 = \langle p^2 - \langle p \rangle^2 \rangle = 2mE_1 \quad \frac{\hbar}{2} = \Delta x \Delta p = a \sqrt{2mE_1} \Rightarrow E_1 = \frac{\hbar^2}{4a^2 m} = \left(\frac{2}{\pi^2} \right) \frac{\pi^2 \hbar^2}{2a^2 m}$$

Resulta algo menor que el resultado riguroso (también en realidad $\Delta x < a$), pero le da una interpretación física:

La energía mínima tiene que ser mayor que cero por el principio de incertidumbre

En realidad ,conociendo la f. de .o de deduce que:

$$\Delta x^2 = \langle x^2 - \langle x \rangle^2 \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a x^2 \sin^2 \frac{\pi x}{a} dx = \dots = \frac{1}{2} a^2 \Rightarrow \Delta x \Delta p = a \sqrt{mE_1} = \frac{\pi}{\sqrt{2}} \hbar > \frac{\hbar}{2}$$

i) Es interesante y también muy sencillo **el problema en 3D: una partícula cuántica encerrada en una caja paralelepédica:**

$$V(x, y, z) = \left[\begin{array}{l} 0, \text{ si } 0 < x < a, 0 < y < b \text{ y } 0 < z < c \\ \infty, \text{ en cualquier otro caso} \end{array} \right]$$

Partícula clásica en un pozo infinito de potencial 1D

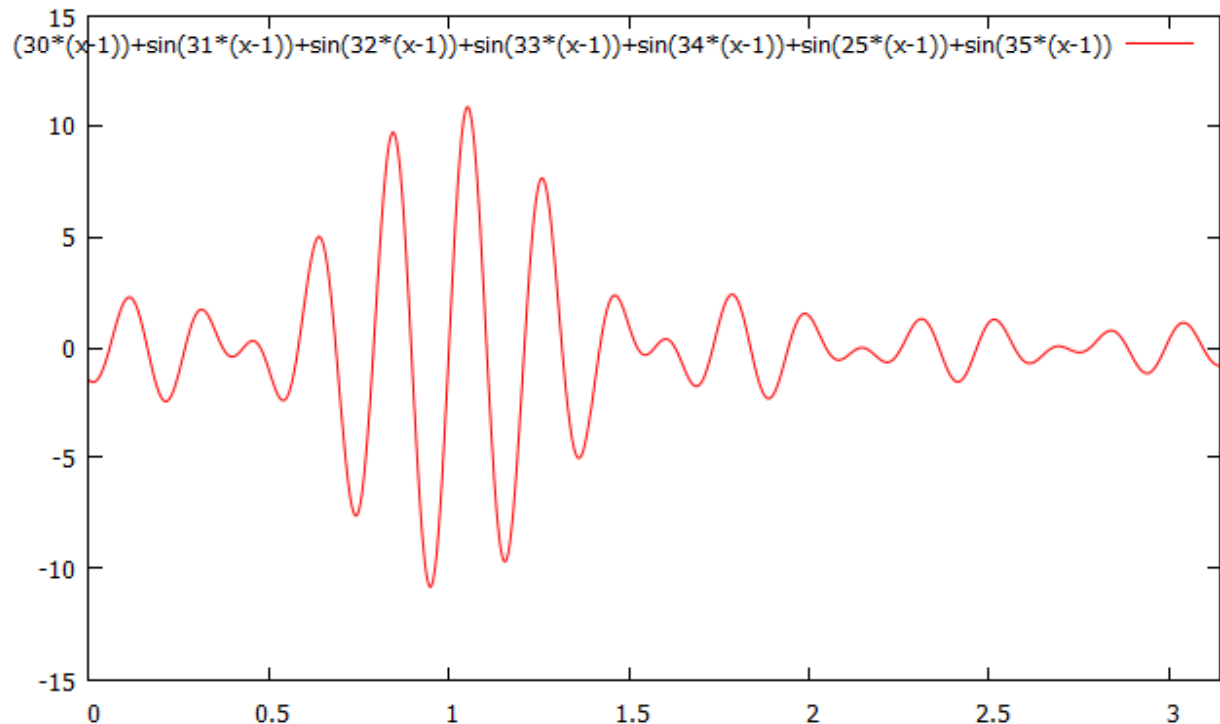
El problema sólo puede ser casi-clásico para valores grandes de n , en cuyo caso la diferencia de energía entre niveles consecutivos es pequeña, relativamente: $(E_{n+1}-E_n)/E_n \cong 2/n$

Una partícula casi-clásica vendría descrita por un paquete de ondas formado por las f. de o. correspondientes a n y unos pocos n 's por encima y por debajo de él.

Como ejemplo: tomemos $n= 25,26,27,..33,34,35$ con la misma amplitud

La función de onda total es un paquete que se mueve a izquierda y derecha y se refleja en las paredes, como una partícula clásica.

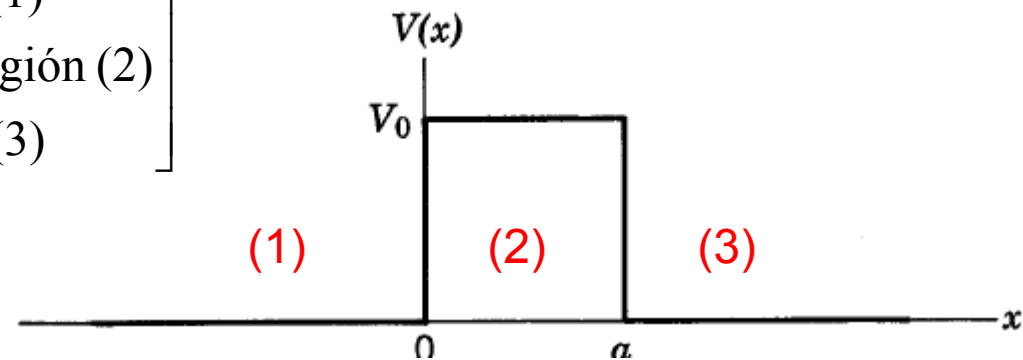
El paquete evoluciona (la posición media cambia) porque no es un estado de energía perfectamente definida



5) Barrera de potencial, efecto "túnel".

Consideremos ahora el caso en que

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{si } x < 0, \text{ región(1)} \\ V_0 = \text{const}, & \text{si } 0 < x < a, \text{ región (2)} \\ 0, & \text{si } x > a, \text{ región(3)} \end{cases}$$



Caso A) $E < V_0$: Definimos $k_1 = k_3 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$; $c_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$

Ec Schr:

$$\begin{aligned} (1) \quad \varphi''_1(x) + k_1\varphi_1(x) &= 0 \Rightarrow \varphi_1(x) = A_1e^{ik_1x} + B_1e^{-ik_1x} \\ (2) \quad \varphi''_2(x) - c_2\varphi_2(x) &= 0 \Rightarrow \varphi_2(x) = A_2e^{c_2x} + B_2e^{-c_2x} \\ (3) \quad \varphi''_3(x) + k_1\varphi_3(x) &= 0 \Rightarrow \varphi_3(x) = A_3e^{ik_1x} + B_3e^{-ik_1x} \end{aligned}$$

Por simplificar consideremos sólo el caso en que en el medio (3) no hay onda propagada hacia la izquierda, es decir $B_3 = 0$.

Por supuesto, lo más general será superposición de este caso y cuando no hay onda hacia la derecha en (1)

Las condiciones de frontera son:

$$\begin{aligned} (1) - (2) \quad A_1 + B_1 &= A_2 + B_2 & (2) - (3) \quad A_2 e^{c_2 a} + B_2 e^{-c_2 a} &= A_3 e^{ik_1 a} \\ ik_1(A_1 - B_1) &= c_2(A_2 - B_2) & c_2(A_2 e^{c_2 a} - B_2 e^{-c_2 a}) &= ik_1 A_3 e^{ik_1 a} \end{aligned}$$

Podemos resolver (ejercicio), en función de A_3 que además podemos suponer real:

$$\begin{aligned} A_2 &= \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{k_1}{c_2} \right) A_3 e^{(ik_1 - c_2)a} & B_2 &= \frac{1}{2} \left(1 - i \frac{k_1}{c_2} \right) A_3 e^{(ik_1 + c_2)a} \\ A_1 &= \frac{1}{2} A_2 \left(1 + \frac{c_2}{ik_1} \right) + \frac{1}{2} B_2 \left(1 - \frac{c_2}{ik_1} \right); & B_1 &= \frac{1}{2} A_2 \left(1 - \frac{c_2}{ik_1} \right) + \frac{1}{2} B_2 \left(1 + \frac{c_2}{ik_1} \right) \end{aligned}$$

Lo más interesante son los **factores de reflexión y de transmisión** de la barrera (hay algo de álgebra pero muy fácil de obtener):

$$T = \left[1 + \frac{\sinh^2 c_2 a}{4 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right)} \right]^{-1}; R = 1 - T$$

Si $c_2 a \gg 1$ (barrera alta y ancha) vale la aproximación :

$$T \cong 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right) e^{-2c_2 a}$$

Lo más importante es que T es pequeño pero no nulo: “EFECTO TÚNEL”.

Una partícula clásica no puede superar la barrera y es totalmente reflejada si $E < V_0$. La pasa por encima con total seguridad si $E > V_0$

La probabilidad no nula de encontrar la partícula donde $E < V_0$ porque $A_2, B_2 \neq 0$ (región prohibida clásicamente) y atravesar la barrera aunque la partícula no tenga energía suficiente para superarla por arriba se llama “efecto túnel” y es uno de los efectos cuánticos más sorprendentes.

Hace muchos años que no se discute ya el efecto túnel, sino que se utiliza en muchas aplicaciones tecnológicas, por ejemplo (entre muchísimos casos):

El microscopio de efecto túnel, donde se determina la anchura de la barrera midiendo el factor de transmisión, para V_0 dado.

Los magnetómetros SQUID, donde se usa el efecto Josephson (en el fondo es efecto túnel) en anillos superconductores. Se determina el flujo magnético que atraviesa el anillo.

Caso B) $E > V_0$ y también $E > 0$, $V_0 < 0$ (pozo de potencial, energía positiva).

Ahora definimos las 3 constantes reales: $k_1 = k_3 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$; $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$

Análogamente a todo lo anterior, las funciones más generales con E definida, y que satisfacen la ec de Schr. en cada zona son:

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}; \varphi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}; \varphi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x} + B_3 e^{-ik_1 x}$$

Vamos a estudiar los casos en que $B_3 = 0$

Igualmente las condiciones de frontera en $x = 0$ y $x = a$ son:

$$\begin{aligned} (1) - (2) \quad A_1 + B_1 &= A_2 + B_2 & (2) - (3) \quad A_2 e^{c_2 a} + B_2 e^{-c_2 a} &= A_3 e^{ik_1 a} \\ ik_1(A_1 - B_1) &= ik_2(A_2 - B_2) & ik_2(A_2 e^{c_2 a} - B_2 e^{-c_2 a}) &= ik_1 A_3 e^{ik_1 a} \end{aligned}$$

Es fácil despejar todo en función de A_3 . Finalmente los factores de reflexión y transmisión quedan (compruébese):

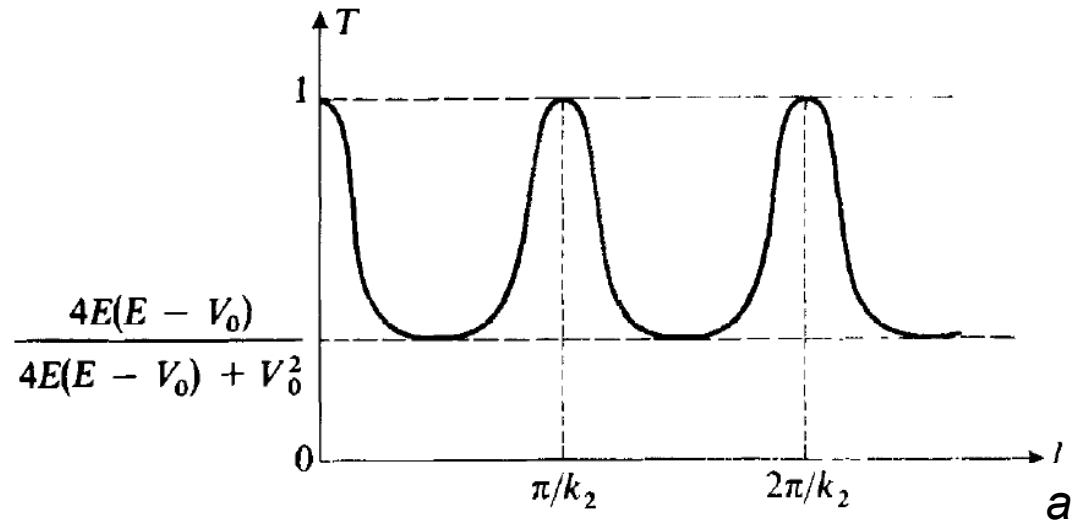
$$R \equiv \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2 = \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 a}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 a}; T \equiv \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = 1 - R$$

Esta situación es completamente análoga a la interferencia de ondas EM múltiples en una lámina plano-paralela de espesor a .

Una partícula clásica nunca sería reflejada, pero una partícula cuántica tiene una probabilidad no nula de reflejarse aunque la energía sea superior a la altura de la barrera

excepto si $\sin k_2 a = 0 \Rightarrow k_2 = \frac{n\pi}{a}$

En que hay **Transmisión total**

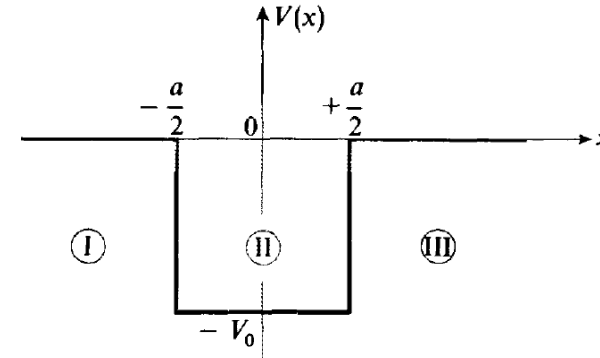


Esa condición se llama de **resonancia** y consiste en que la semi-longitud de onda en el medio (2) es un múltiplo entero de la anchura de la barrera.

En la óptica se usa este efecto para crear películas antirreflejantes.

6) Pozo cuadrado de potencial de paredes de altura finita. Estados ligados

$$V(x) = \left[\begin{array}{l} 0, \text{ si } x < -a/2, \text{ región(1)} \\ -V_0 = \text{const}, \text{ si } -a/2 < x < a/2, \text{ región (2)} \\ 0, \text{ si } x > a/2, \text{ región(3)} \end{array} \right]$$



(Notar que ponemos el origen de coordenadas en el centro del pozo)

Estudiaremos el caso $-V_0 \leq E < 0$

Una vez más definimos las constantes reales: $\rho = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$; $k = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar}$

La función de onda más general se compone de tres partes:

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{\rho x} + B_1 e^{-\rho x}; \varphi_2(x) = A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx}; \varphi_3(x) = A_3 e^{\rho x} + B_3 e^{-\rho x}$$

Para que sea de cuadrado integrable deben ser $B_1 = A_3 = 0$, y la onda en los medios (1) y (3) no es cero, sino **evanescente**.

Las condiciones de frontera en $x = -a/2$ dan:

$$A_2 = e^{(-\rho+ik)a/2} \frac{\rho+ik}{2ik} B_1$$

$$B_2 = e^{-(\rho+ik)a/2} \frac{\rho-ik}{2ik} B_1$$

Y en $x = a/2$ dan:

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{e^{-\rho a}}{4ik\rho} \left[(\rho+ik)^2 e^{ika} - (\rho-ik)^2 e^{-ika} \right]$$

$$\frac{B_3}{A_1} = \frac{\rho^2 + k^2}{2k\rho} \sin ka$$

Ya hemos puesto $B_1 = 0$, ahora, para que $A_3 = 0$ se necesita que:

$$(\rho+ik)^2 e^{ika} - (\rho-ik)^2 e^{-ika} = 0 \Rightarrow \left(\frac{\rho-ik}{\rho+ik} \right)^2 = e^{2ika}$$

Las soluciones de esta ecuación dan ρ , k y por tanto los niveles permitidos de energía. Una vez más son las ondas que interfieren constructivamente al reflejarse en las paredes, pero ahora la condición es más complicada porque el desfase en la reflexión total no es de π .

Hay dos casos posibles:

$$\text{i) } \frac{\rho-ik}{\rho+ik} = -e^{ika}; \text{ ii) } \frac{\rho-ik}{\rho+ik} = +e^{ika}$$

Las soluciones no se pueden obtener analíticamente (es la primera vez en este curso, de una larga serie de casos), pero sí numéricamente. **Lo más instructivo es obtenerla gráficamente** con pequeña manipulación de las ecuaciones

En el **caso i)** despejamos ρ/k : $\frac{\rho}{k} = \tan\left(\frac{ka}{2}\right) (> 0)$

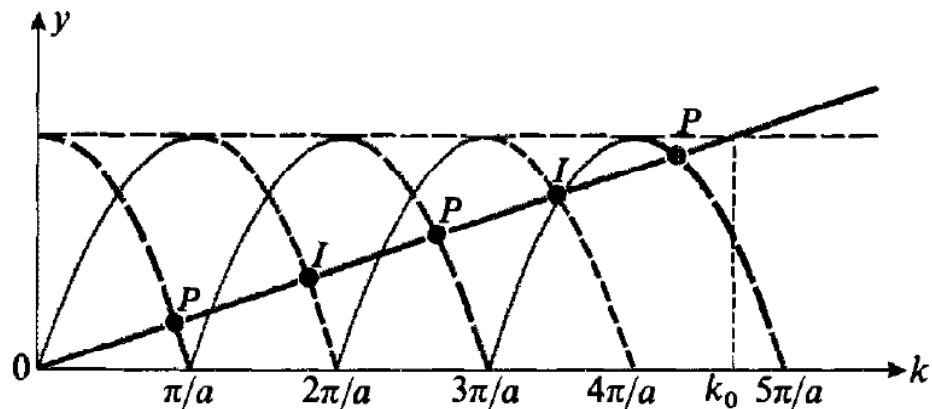
Definimos una nueva constante: $k_0 = \frac{\sqrt{-2mV_0}}{\hbar} = \sqrt{k^2 + \rho^2}$

Ahora escribimos: $\frac{1}{\cos^2\left(\frac{ka}{2}\right)} = 1 + \tan^2\left(\frac{ka}{2}\right) = 1 + \left(\frac{\rho}{k}\right)^2 = \left(\frac{k_0}{k}\right)^2 \Rightarrow \left|\cos\left(\frac{ka}{2}\right)\right| = \frac{k}{k_0}$

Podemos representar gráficamente $|\cos(ka/2)|$ y k/k_0 . Los puntos de corte cuando $\tan(ka/2) > 0$ son las soluciones de la ecuación (puntos P en la figura)

Análogamente en el **caso ii)** las soluciones se obtienen por los puntos de corte entre k/k_0 y

$|\sin(ka/2)|$ siendo ahora $\tan(ka/2) < 0$ (puntos I en la figura).



7) La relación de incertidumbre de Heisenberg

Definición precisa de la desviación cuadrática media:

$$\Delta x^2 \equiv \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) (x - \langle x \rangle)^2 \psi(x, t) dx$$
$$\Delta p^2 \equiv \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \langle p \rangle \right)^2 \psi(x, t) dx$$

Con estas definiciones se puede demostrar rigurosamente que si $\Psi(x, t)$ obedece a la ec. de Schrödinger, entonces:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar$$

* Ya lo hemos visto en el caso de una partícula libre, para un paquete de ondas especial y sin dar una definición precisa de $\Delta x \Delta p$.

* Esta relación indica que es imposible un estado en que x y p estén exactamente determinadas (en MCL se da por supuesto que sí es posible sin ninguna discusión).

* Como ya vimos, (detalles matemáticos aparte) es una consecuencia de las propiedades de las ondas: cuanto más monocromática es, más deslocalizado (mayor longitud de coherencia) está el paquete en el espacio.

Demostración de la relación de incertidumbre de Heisenberg (H. Weyl, 1928, Landau-Lifshitz QM, II-15)

Sin pérdida de generalidad y por simplificar la notación supongamos que en el instante t , $\langle x \rangle = 0$ y $\langle p \rangle = 0$. Sea Ψ la función de onda, de cuadrado integrable.

Obviamente, si α es una constante real cualquiera se cumple: $\int_{-\infty}^{\infty} \alpha x \psi + \frac{d\psi}{dx} \Big|^2 dx \geq 0$

Calculemos las siguientes integrales: 1) $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi|^2 dx \equiv (\Delta x)^2$

$$2) \int_{-\infty}^{\infty} \left(x \frac{d\psi^*}{dx} \psi + x \psi^* \frac{d\psi}{dx} \right) dx = \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial |\psi|^2}{\partial x} dx = \dots p.p. = - \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = -1$$

Donde la última integral se realiza por partes $u = x$, $dv = d|\psi|^2$ y $uv = \left[x|\psi|^2 \right]_{-\infty}^{+\infty} = 0$

$$3) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx = \dots p.p. = - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx = - \frac{1}{\hbar^2} (\Delta p)^2 \quad (\text{Aquí se usa la ec de Schrödinger})$$

Sustituyendo en la desigualdad de arriba queda: $\alpha^2 (\Delta x)^2 - \alpha + \frac{1}{\hbar^2} (\Delta p)^2 \geq 0$

Esta expresión parabólica en α debe ser $\geq 0 \quad \forall \alpha$, lo que implica que no puede tener dos raíces reales y el discriminante debe ser ≤ 0 :

$$Discr = 1 - 4 \frac{1}{\hbar^2} (\Delta p)^2 (\Delta x)^2 \leq 0$$

$$\Rightarrow \Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar \quad \text{q.e.d.}$$

Veremos que hay casos en que puede darse la igualdad (paquete gaussiano)

8) Solución numérica de la ec. De Schrödinger

La ec. de Schrödinger es muy difícil de resolver para un potencial cualquiera. El único caso sencillo es el potencial constante a trozos (escalones, pozos o barreras de potencial).

Casi los otros únicos dos casos en que es posible una solución analítica, **y aún así difícil**, son el oscilador armónico y el átomo de hidrógeno, que más tarde veremos.

Sin embargo frecuentemente se presentan casos de potenciales de otras formas, por lo que en la era de los ordenadores hacen falta métodos de solución numéricos.

Vamos a estudiar uno particularmente sencillo llamado de diferencias finitas

(que es como aplicar la “fuerza bruta” de cálculo del ordenador, pero simplísimo de programar)

Se incluye un programa en lenguaje C (schrodinger.c) que resuelve la ec. por este método.

La **solución numérica por diferencias finitas** consiste en considerar la función de ondas en puntos discretos, próximos x_j :

$$\varphi(x) \rightarrow \varphi(x_i) \equiv \varphi_i$$

Si llamamos $\Delta = x_{i+1} - x_i$, podemos hacer una **aproximación numérica de las derivadas** usando el desarrollo de Taylor alrededor de x_i , que suponemos muy bien aproximado:

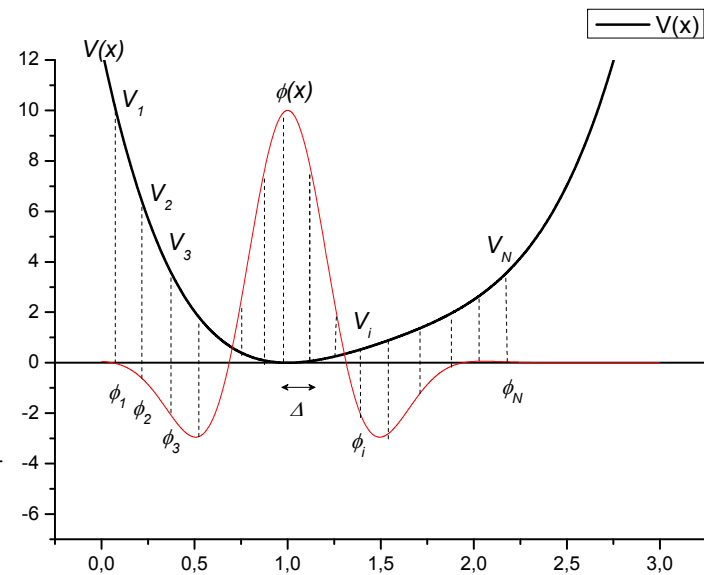
$$\varphi(x_{i+1}) = \varphi(x_i) + \varphi'(x_i)\Delta + \frac{1}{2!}\varphi''(x_i)\Delta^2 + \frac{1}{3!}\varphi'''(x_i)\Delta^3 + \dots$$

$$\varphi(x_{i-1}) = \varphi(x_i) - \varphi'(x_i)\Delta + \frac{1}{2!}\varphi''(x_i)\Delta^2 - \frac{1}{3!}\varphi'''(x_i)\Delta^3 + \dots$$

Sumando ambas ecuaciones:

$$\varphi_{i+1} + \varphi_{i-1} = 2\varphi_i + \varphi_i'' \Delta^2 + \dots \Rightarrow \varphi_i'' \cong \frac{\varphi_{i+1} + \varphi_{i-1} - 2\varphi_i}{\Delta^2}$$

Y restándolas: $\varphi_{i+1} - \varphi_{i-1} = 2\varphi_i' \Delta + \dots \Rightarrow \varphi_i' \cong \frac{\varphi_{i+1} - \varphi_{i-1}}{2\Delta}$



Hacemos $V_i \equiv V(x_i)$ y sustituimos las aproximaciones en la ec. de Schr. para los puntos x_i :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\varphi_{i+1} + \varphi_{i-1} - 2\varphi_i}{\Delta^2} + V_i \varphi_i = E \varphi_i$$

Conviene reorganizar las ecuaciones y escribirlas de la manera siguiente:

$$\left(2 + \frac{\Delta^2 2mV_i}{\hbar^2}\right)\varphi_i - \varphi_{i+1} - \varphi_{i-1} = \frac{2m\Delta^2 E}{\hbar^2}\varphi_i$$

Definimos el número constante adimensional:
que es la energía multiplicada por constantes

$$\lambda = \frac{2m\Delta^2 E}{\hbar^2}$$

Definimos también el conjunto de valores

$$v_i = \left(2 + \frac{\Delta^2 2mV_i}{\hbar^2}\right)$$

Sustituyendo queda:

$$v_i\varphi_i - \varphi_{i+1} - \varphi_{i-1} = \lambda\varphi_i$$

Considerando los números φ_i como las componentes de un vector, el anterior sistema lineal homogéneo de ecuaciones algebraicas expresa un problema de **valores propios** de una matriz **tridiagonal** (sólo son distintos de cero los elementos de la diagonal principal y las dos adyacentes) de tantos elementos como puntos hayamos tomado.

$$\begin{pmatrix} v_1 & -1 & & \\ -1 & v_2 & -1 & \\ & -1 & v_3 & -1 \\ & & -1 & \dots \end{pmatrix}$$

Dicha matriz tiene los valores v_i en la diagonal principal, -1 en todos los puntos de las diagonales superior e inferior, y 0 en todos los demás puntos.

Este tipo de matrices son especialmente fáciles y rápidas de diagonalizar

Nótese que al plantear así el problema hemos impuesto implícitamente que la función se anula en un punto a la izquierda del primero y uno a la derecha del último, lo que va bien para una partícula confinada, cuando el potencial se hace muy grande (hacemos que el potencial se haga infinito en los extremos)

En otros casos es fácil imponer otras condiciones de contorno

Se suministra libremente en la web

http://fmc.unizar.es/people/elias/Fisica_Cuantica/Fisica_Cuantica.htm

el programa `schrodinger.c` (y un ejecutable construido con él) que diagonaliza la matriz.

Para la diagonalización se utiliza el paquete informático libre `eispack`

Para compilar el programa `schrodinger.c` se necesita tener en el mismo directorio (es muy fácil modificar el programa para que busque las funciones en otro sitio) los archivos `eispack.h` (cabeceras) y `eispack.c` (archivos fuente de las funciones usadas)

Ej 1: sol numérica del pozo cuadrado de potencial 1 D

Tal como está el programa `schrodinger.c` incluye la función `double V(double x)` que considera dos casos: pozo cuadrado de potencial y oscilador armónico.

Basta modificar ligeramente dicha función para considerar otros casos.

Hay que poner `iarmonico=0;` y compilar el programa.

El programa pone $V=0$ si $0 < x < 10^{-10}\text{m}$ para una partícula de $m = 1./6.02217\text{e}26$ kg (=1 uma \cong masa del protón)

Calcula cada función de onda en 1001 puntos y la energía correspondiente .

(también es fácil y “más científico” programarlo en función de a^2m , con lo que la solución es universal. De un caso a otro sólo hay que multiplicar por un factor)

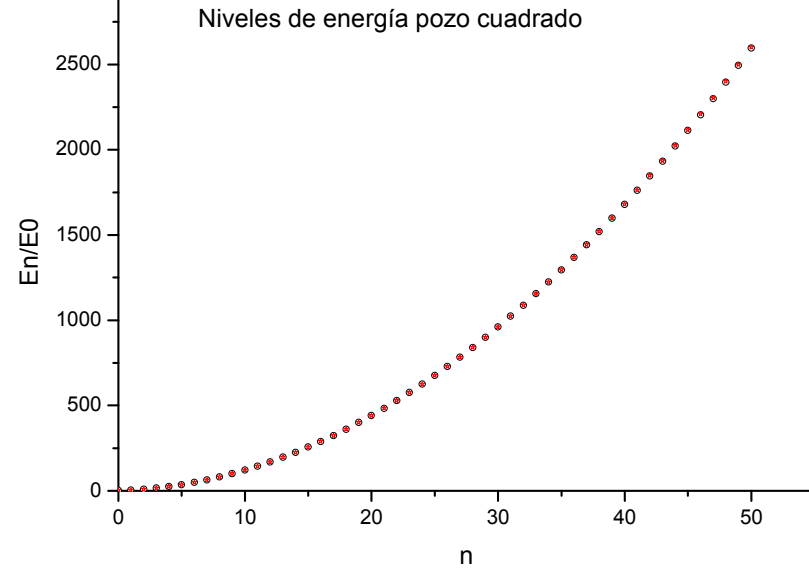
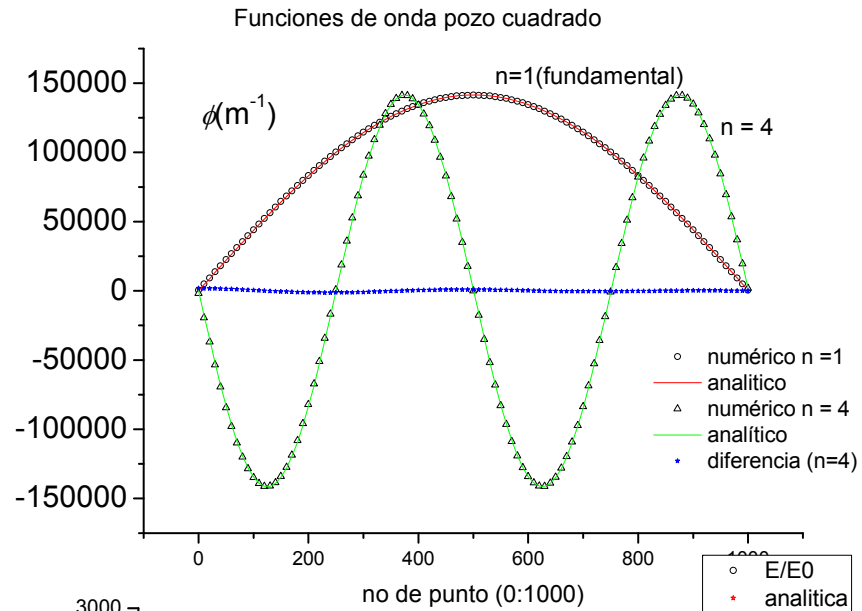
Resultados del programa:

Datos. $m = 1./6.02217e26 \text{ kg} = 1 \text{ uma}$, $a = 2 \times 10^{-10} \text{ m}$
 $\omega = 1 \times 10^{14} \text{ rad/s}$
 (cte sin ningún significado aquí)

Lista 51 primeros autovalores y energías

n-1	lambda_n	En(eV)	En/hw	E/E0
0	0,000010	0,020588	0,998004	1,000000
1	0,000039	0,082352	3,992007	3,999990
2	0,000088	0,185291	8,981979	8,999941
3	0,000157	0,329404	15,967871	15,999803
4	0,000246	0,514689	24,949614	24,999508
5	0,000354	0,741146	35,927120	35,998968
6	0,000482	1,008772	48,900282	48,998073
7	0,000629	1,317563	63,868971	63,996697
8	0,000796	1,667517	80,833040	80,994692
9	0,000983	2,058631	99,792324	99,991890
10	0,001189	2,490901	120,746634	120,988106
11	0,001415	2,964322	143,695766	143,983132
12	0,001661	3,478890	168,639494	168,976743
13	0,001926	4,034600	195,577573	195,968693
14	0,002211	4,631446	224,509737	224,958716
15	0,002516	5,269423	255,435702	255,946528
16	0,002840	5,948524	288,355165	288,931824
17	0,003184	6,668742	323,267802	323,914279
18	0,003548	7,430071	360,173269	360,893551
19	0,003931	8,232502	399,071204	399,869275
20	0,004334	9,076029	439,961224	440,841068

...



Ej 2: sol numérica del oscilador armónico 1 D

Tomamos otra vez el programa `schrodinger.c`

Hay que poner `iarmonico=1`; y compilar el programa.

El programa pone $V(x) = (1/2) m \omega^2 x^2$ para una partícula de $m = 1./6.02217 \times 10^{26}$ kg (=1 uma \cong masa del protón) con $\omega = 10^{14}$ rad/s

Calcula las funciones de onda y las energías en 1001 puntos.

También se puede programar usando unidades adimensionales, lo que da una solución universal.

Calcula 1001 energías y funciones de onda pero sólo lista las 50 primeras energías y una f. de o. elegida en la cabecera del programa (nf =0 => fundamental)

Resultados (mismos datos anteriores)

Lista 21 primeros autovalores y energías

n	lambda_n	En(eV)	En/hw	E/E0
0	0,000798	0,032910	0,499975	1,000000
1	0,002395	0,098726	1,499875	2,999900
2	0,003991	0,164535	2,499676	4,999601
3	0,005588	0,230338	3,499376	6,999102
4	0,007184	0,296134	4,498977	8,998403
5	0,008780	0,361924	5,498478	10,997504
6	0,010376	0,427707	6,497879	12,996406
7	0,011972	0,493484	7,497180	14,995107
8	0,013567	0,559254	8,496381	16,993609
9	0,015162	0,625017	9,495482	18,991912
10	0,016758	0,690774	10,494483	20,990014
11	0,018353	0,756524	11,493384	22,987916
12	0,019948	0,822268	12,492186	24,985618
13	0,021542	0,888005	13,490887	26,983121
14	0,023137	0,953736	14,489488	28,980423
15	0,024731	1,019460	15,487990	30,977525
16	0,026326	1,085177	16,486391	32,974427
17	0,027920	1,150888	17,484692	34,971130
18	0,029514	1,216592	18,482893	36,967632
19	0,031107	1,282290	19,480994	38,963933
20	0,032701	1,347981	20,478995	40,960035

Solución analítica exacta

(se verá más tarde):

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$$

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega = 0.03291088 \text{ eV}$$

