



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

# ACTA DE EXAMEN DE GRADO

No. 00057

Matrícula: 2151800763

EL OSCILADOR ARMÓNICO  
CONFINADO

En la Ciudad de México, se presentaron a las 11:00 horas del día 20 del mes de octubre del año 2017 en la Unidad Iztapalapa de la Universidad Autónoma Metropolitana, los suscritos miembros del jurado:

DR. EUGENIO LEY KOO  
DR. VICTOR DAVID GRANADOS GARCIA  
DR. NORBERTO AQUINO AQUINO

Bajo la Presidencia del primero y con carácter de Secretario el último, se reunieron para proceder al Examen de Grado cuya denominación aparece al margen, para la obtención del grado de:

MAESTRA EN CIENCIAS (FISICA)

DE: ELIZABETH CRUZ OSORIO

y de acuerdo con el artículo 78 fracción III del Reglamento de Estudios Superiores de la Universidad Autónoma Metropolitana, los miembros del jurado resolvieron:

Aprobar

Acto continuo, el presidente del jurado comunicó a la interesada el resultado de la evaluación y, en caso aprobatorio, le fue tomada la protesta.



ELIZABETH CRUZ OSORIO  
ALUMNA

REVISÓ  
LIC. JULIO CÉSAR DE LARA ISASSI  
DIRECTOR DE SISTEMAS ESCOLARES

DIRECTOR DE LA DIVISIÓN DE CBI

  
DR. JOSE GILBERTO CORDOBA HERRERA

PRESIDENTE

  
DR. EUGENIO LEY KOO

VOCAL

  
DR. VICTOR DAVID GRANADOS GARCIA

SECRETARIO

  
DR. NORBERTO AQUINO AQUINO



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA - IZTAPALAPA  
DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

# EL OSCILADOR ARMÓNICO CONFINADO

Tesis que presenta  
**Elizabeth Cruz Osorio**  
Para obtener el grado de:  
**Maestro en ciencias (Física)**

Asesor: Dr. Norberto Aquino Aquino

Jurado calificador:

Presidente: Dr. Eugenio Ley Koo

UNAM

Secretario: Dr. Norberto Aquino Aquino

UAM-I

Vocal: Dr. Victor David Granados García

IPN

Ciudad de México, Octubre 2017.



# Agradecimientos

Expreso mis mas sinceros agradecimientos a mis padres, Enrique Cruz y Blandina Osorio por haberme motivado y apoyado a continuar con mi formación académica. A Nabor Eduardo Guzmán Vazquez por ser como un segundo padre para mi, por todo su apoyo que me ha brindado para poder alcanzar este objetivo, gracias. A mis hermanos por apoyarme siempre.

Al Dr. Norberto Aquino Aquino, por haber dirigido este trabajo de tesis, por compartir conmigo sus conocimientos, por el tiempo dedicado a la revisión de este trabajo, así como, las observaciones y sugerencias realizadas al mismo.

Al Dr. Eugenio Ley Koo y el Dr. Victor David Granados, por ser miembros del jurado, por el tiempo dedicado a la revisión del trabajo de tesis, por sus útiles comentarios y sugerencias realizados a este trabajo.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por la beca que me otorgó durante el posgrado.

A la Universidad Autónoma Metropolitana por brindarme la oportunidad de continuar con mi formación académica.

Por último, a mis amigos por todas esas palabras de aliento en los momentos que se requieren.



# Resumen

En el presente trabajo se realizó el estudio del sistema cuántico oscilador armónico confinado, se calcularon los valores propios de energía, sus correspondientes funciones de onda y algunos valores esperados de la posición. Comenzamos con el estudio del oscilador armónico unidimensional confinado en una caja de paredes impenetrables de longitud  $2a$ , se obtuvieron los valores propios de energía mediante el método variacional lineal, diagonalizando la matriz hamiltoniana en la base de la partícula libre en una caja de potencial infinito. Estos resultados se compararon con los ya reportados en la literatura donde se utiliza el mismo método de aproximación e igual número de funciones base. Otro de los métodos que se aplicó para el cálculo de las energías propias, es teoría de perturbaciones independiente del tiempo a primer orden. Para determinar cual de los dos métodos es el que nos proporciona mejores resultados, comparamos con las energías propias que se obtuvieron en forma exacta, cuyos valores son las raíces de la función hipergeométrica confluyente.

Continuamos con el oscilador armónico isotrópico bidimensional, confinado en el interior de una región circular impenetrable. Para la solución, aplicamos teoría de perturbaciones independiente del tiempo y el método variacional lineal. Como la solución exacta de este problema ya se encuentra publicado en la literatura, esto nos permitió comparar la precisión de los resultados obtenidos y la eficiencia de los métodos de aproximación empleados. También, mostramos el comportamiento del espectro de energía como función del radio de confinamiento, además de graficar el módulo al cuadrado de las funciones de onda del sistema, que representa la densidad de probabilidad. Los cálculos numéricos reportados en el presente trabajo se obtuvieron utilizando el software computacional MATHEMATICA 9.



# Índice general

Agradecimientos	III
Resumen	V
Lista de figuras	IX
Lista de tablas	XI
Lista de acrónimos	XIII
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Objetivos</b>	<b>3</b>
2.1. Objetivo general . . . . .	3
2.1.1. Objetivos particulares . . . . .	3
<b>3. Fundamentos teóricos</b>	<b>5</b>
3.1. Introducción . . . . .	5
3.2. Método variacional lineal . . . . .	5
<b>4. Partícula libre en una caja impenetrable</b>	<b>13</b>
4.1. Partícula libre en una caja unidimensional . . . . .	13
4.2. Partícula libre en una caja circular . . . . .	15
<b>5. El oscilador armónico confinado en una dimensión</b>	<b>25</b>
5.1. Teoría de perturbaciones independiente del tiempo . . . . .	25
5.2. Método variacional lineal . . . . .	30



5.2.1. Valores propios de la energía . . . . .	32
5.2.2. Funciones propias . . . . .	37
5.2.3. Valor esperado de $x^2$ . . . . .	39
5.3. Conclusiones . . . . .	41
<b>6. El oscilador armónico confinado en una caja circular</b>	<b>43</b>
6.1. Teoría de perturbaciones independiente del tiempo . . . . .	44
6.2. Método variacional lineal . . . . .	49
6.2.1. Eigenvalores de energía . . . . .	50
6.2.2. Funciones propias . . . . .	54
6.2.3. Valor esperado de la posición $\langle \rho \rangle$ . . . . .	61
6.3. Conclusiones . . . . .	63
<b>7. Conclusiones y perspectivas</b>	<b>65</b>
<b>Referencias</b>	<b>67</b>
<b>Apéndices</b>	<b>70</b>
A. Cálculo de la constante de normalización $C_{nm}$	73
B. Adimensionalización del hamiltoniano del oscilador armónico isotrópico bidimensional	77
C. Cálculo del término $W_{bb}$	81
D. Código del programa en Mathematica	85
Artículo: The 1-dimensional confined harmonic oscillator revisited	86

# Lista de figuras

4.1.	Partícula confinada en una caja circular. . . . .	16
4.2.	Funciones de Bessel, de primera y segunda clase. . . . .	19
4.3.	Funciones de onda $\psi_{nm}(\rho, \phi)$ con $(n_r, m) = (0, 0), (1, 0)$ y $(2, 0)$ . . . . .	22
4.4.	Gráfica de $ \psi_{nm}^\pm(\rho, \phi) ^2$ para $ m  = 1$ y $n_r = 0$ . . . . .	22
4.5.	Gráficas de la densidad de probabilidad $ \psi_{nm}(\rho, \phi) ^2$ para $(n_r, m) = (0, 0), (1, 0)$ y $(2, 0)$ . . . . .	23
4.6.	Gráficas de la densidad de probabilidad $ \psi_{nm}^+(\rho, \phi) ^2$ para $(n_r, m) = (0, 1), (1, 1)$ y $(2, 1)$ . . . . .	23
4.7.	Gráficas de la densidad de probabilidad $ \psi_{nm}^+(\rho, \phi) ^2$ para $(n_r, m) = (0, 4), (1, 4)$ y $(2, 4)$ . . . . .	24
4.8.	Gráficas de $ \psi_{15}^+(\rho, \phi) ^2$ y $ \psi_{30}(\rho, \phi) ^2$ . . . . .	24
5.1.	Potencial del oscilador armónico confinado simétricamente. . . . .	27
5.2.	Gráficas de algunas funciones propias del OAUC . . . . .	38
6.1.	Gráfica de la energía como función del radio de confinamiento. . . . .	52
6.2.	Niveles de energía . . . . .	53
6.3.	Gráficas de $\psi_{nm}(\rho, \phi)$ , $ \psi_{nm}(\rho, \phi) ^2$ y proyección de la densidad de probabilidad $ \psi_{nm}(\rho, \phi) ^2$ sobre el plano $xy$ ; con $(n, m) = (0, 0), (1, 0), (2, 0)$ y $(3, 0)$ para el OAIBC . . . . .	56
6.4.	Gráficas de $\psi_{nm}^+(\rho, \phi)$ , $ \psi_{nm}^+(\rho, \phi) ^2$ y proyección de la densidad de probabilidad $ \psi_{nm}^+(\rho, \phi) ^2$ sobre el plano $xy$ ; con $(n, m) = (0, 1), (1, 1), (2, 1)$ y $(3, 1)$ para el OAIBC en una región circular. . . . .	58
6.5.	Gráficas de $\psi_{nm}^+(\rho, \phi)$ , $ \psi_{nm}^+(\rho, \phi) ^2$ y proyección de la densidad de probabilidad $ \psi_{nm}^+(\rho, \phi) ^2$ sobre el plano $xy$ , con $(n, m) = (0, 2), (1, 2), (2, 2)$ y $(3, 2)$ para el OAIBC en una región circular. . . . .	60



# Lista de tablas

5.1. Eigenvalores de energía del OAUC obtenidos con teoría de perturbaciones	29
5.2. Comparación en los valores de energía obtenidos con el método variacional lineal y los de la referencia [1]. . . . .	33
5.3. Tabla comparativa de valores propios de energía del OAUC. . . . .	36
5.4. Valores esperados de $x^2$ para distintas longitudes de la caja. . . . .	39
5.5. Comparación de los valores esperados de $x^2$ obtenidos en el presente trabajo aplicando el método variacional lineal y los valores exactos reportados en la literatura. . . . .	40
6.1. Energías del OAIBC calculadas mediante teoría de perturbaciones. . .	48
6.2. Energías del OAIBC calculadas mediante el método variacional lineal. .	51
6.3. Comparación entre los valores propios de energía del OAIBC. . . . .	53
6.4. Valores esperados de la posición $\langle \rho \rangle$ , obtenidos con la función de onda construida mediante el método variacional lineal. . . . .	61
6.5. Comparación de los valores esperados de la posición $\langle \rho \rangle$ , obtenidos con el método variacional lineal y con la solución exacta. . . . .	62



# Lista de acrónimos

OAU: Oscilador Armónico Unidimensional

OAUC: Oscilador Armónico Unidimensional Confinado

OAIBC: Oscilador Armónico Isotrópico Bidimensional Confinado



# Capítulo 1

## Introducción

En 1937 Michels y colaboradores [2] estudiaron por primera vez el modelo de un átomo comprimido. Se trata del átomo de hidrógeno confinado en el centro de una caja esférica de paredes impenetrables, esto con el fin de estudiar los efectos de la compresión sobre la polarizabilidad atómica. Desde entonces, los problemas de los átomos confinados han cobrado una relevante importancia y por ende se han venido estudiando a lo largo de los años [3]. La importancia radica en que el confinamiento espacial modifica las propiedades del sistema, como son, el espectro de energía, las probabilidades de transición, la polarizabilidad, entre otras [4], [5], todos ellas con respecto al caso libre.

El confinamiento espacial de los sistemas cuánticos ha ido en aumento debido a la variedad de aplicaciones en diferentes áreas de la Física y en la Química [6], [7], [8]. Entre sus aplicaciones tenemos el estudio y la producción de átomos artificiales en materiales semiconductores [6], en la investigación de propiedades termodinámicas de un gas ideal en un recipiente de tamaño finito [9], por mencionar algunos. Cabe mencionar, que cuando nos referimos a un sistema cuántico *confinado espacialmente* queremos decir, que sus funciones de onda satisfacen ciertas condiciones de frontera para un determinado valor en las coordenadas espaciales.

Entre los sistemas cuánticos confinados que se han estudiado, se encuentra el oscilador armónico confinado, principalmente el oscilador armónico unidimensional (OAU) [10], [11], [12], [1], [13], [14]. Algunas de las aplicaciones del sistema oscilador armónico unidimensional confinado (OAUC) es como modelo en la transformación protón-deuterón como fuente de energía en estrellas densas [15], [16], en la veloci-



dad de escape de las estrellas del cúmulo galáctico [17]. Por otra parte, el oscilador armónico confinado en dos y tres dimensiones no ha recibido tanta atención como el caso unidimensional, pero no por ello menos importante [18], he ahí la razón de incluir en este trabajo el estudio del oscilador armónico isotrópico bidimensional confinado (OAIBC).

Como ya hemos mencionado, el sistema cuántico confinado del OAUC ya ha sido estudiado por distintos autores, en este trabajo haremos una revisión en los valores propios de energía y compararemos con los que se encuentran ya reportados en la literatura, el objetivo es obtener una mayor precisión en los resultados, lo cual podría servir como referencia en la precisión de cálculos futuros. Por otra parte, el sistema OAIBC en una región circular de paredes impenetrables ha sido resuelto de forma exacta de acuerdo con [18] y [19]. Sin embargo, en este trabajo se resolverá el mismo problema pero ahora empleando un método de aproximación conocido como el método variacional lineal, el cual, a pesar de ser un método bastante sencillo de implementar proporciona resultados muy precisos, comparados con los resultados exactos.

El trabajo se encuentra estructurado de la siguiente manera. Comenzamos con los objetivos planteados a alcanzar a lo largo del desarrollo del trabajo de tesis, posteriormente nos introducimos en el marco teórico, en el cual se detalla uno de los principales métodos de aproximación que se emplea en la solución de los sistemas cuánticos confinados por paredes impenetrables. Después, se dedica un capítulo a la solución del problema de la partícula confinada en una caja unidimensional de longitud  $2a$ , así como también en una región circular de radio  $\rho_0$ . Una vez planteada la herramienta a utilizar, comenzamos a abordar el sistema del OAUC en una caja rectangular y posteriormente el OAIBC en el interior de una región circular. Finalmente, damos las conclusiones del trabajo, así como las perspectivas del mismo.

# Capítulo 2

## Objetivos

### 2.1. Objetivo general

Estudiar el efecto de confinamiento espacial del sistema cuántico oscilador armónico confinado, utilizando dos métodos aproximados; teoría de perturbaciones independiente del tiempo y el método variacional lineal.

#### 2.1.1. Objetivos particulares

- Calcular los eigenvalores de energía, funciones de onda así como también algunos valores esperados de  $x^2$  del oscilador armónico, confinado en una caja unidimensional, en función de la longitud de la caja.
- Realizar una comparación de los valores propios de la energía para el OAUC con los ya reportados en la literatura.
- Obtener las energías propias, funciones de onda y valores esperados de la posición, en función del radio de confinamiento del OAIBC en una caja circular de paredes impenetrables.



# Capítulo 3

## Fundamentos teóricos

### 3.1. Introducción

En la mayoría de los casos encontramos sistemas en los cuales la ecuación de Schrödinger no tiene una solución exacta, sin embargo, es posible obtener soluciones aproximadas para dichos sistemas [20].

En este capítulo se presenta la base teórica de uno de los métodos aproximados que utilizamos en este trabajo para la obtención de los valores propios de energía y funciones de onda de un sistema.

### 3.2. Método variacional lineal

El método variacional nos permite aproximar la energía del estado base de un sistema sin resolver directamente la ecuación de Schrödinger. Dado el hamiltoniano  $\hat{H}$  del sistema con funciones y valores propios desconocidos, se propone una función aproximada  $\phi$  en términos de un cierto número de parámetros que nos permiten obtener la mejor solución aproximada. Éste método se basa en el siguiente teorema que permite calcular una cota superior a la energía del estado fundamental del sistema.

**Teorema de variación.** *Dado un sistema cuyo operador hamiltoniano  $\hat{H}$  es independiente del tiempo y eigenvalor más bajo de energía  $E_1$ , si  $\phi$  es una función bien comportada que depende de las coordenadas del sistema y satisface las condiciones de*

frontera del problema, entonces

$$\frac{\int \phi^* \hat{H} \phi d\tau}{\int \phi^* \phi d\tau} \geq E_1. \quad (3.1)$$

Si la función  $\phi$  está normalizada, la expresión anterior se reduce a

$$\int \phi^* \hat{H} \phi d\tau \geq E_1. \quad (3.2)$$

A ambas expresiones se les conoce como integral variacional, mientras que a la función  $\phi$  se le llama función variacional de prueba.

Para tener una buena aproximación a la energía  $E_1$  del estado base del sistema, podemos utilizar diferentes funciones variacionales de prueba y buscamos aquella que nos proporcione el valor más bajo de la integral variacional. De acuerdo con el teorema, mientras más bajo sea el valor de la integral variacional, mejor será la aproximación que obtengamos para  $E_1$ .

Sea  $\psi_1$  la función de onda exacta del estado base del sistema, entonces

$$\hat{H}\psi_1 = E_1\psi_1,$$

por lo que la integral variacional es igual a  $E_1$ . Así, la función de onda del estado base o fundamental nos proporciona el valor mínimo de la integral variacional. Por tanto, cabe esperar, que cuanto más bajo sea el valor de la integral variacional (Ec. 3.2), la función variacional de prueba se aproxima aún más a la función de onda exacta  $\psi_1$  del problema. Lo que se realiza en la práctica, es introducir varios parámetros en la función de prueba  $\phi$  y variar estos parámetros de tal forma que se minimice la integral variacional.

Centremos nuestra atención en una función variacional de prueba escrita como una combinación lineal de  $n$  funciones linealmente independientes  $f_1, f_2, \dots, f_n$

$$\phi = \sum_{j=1}^n c_j f_j, \quad (3.3)$$

donde los coeficientes  $c_j$  son parámetros que son determinados mediante la minimización de la integral variacional (Ec. 3.1), las funciones  $f_j$ , son llamadas funciones base, las cuales son conocidas y satisfacen las condiciones de frontera del problema.

Restringiendo que  $c_j$  y  $f_j$  son reales, aplicamos el teorema variacional a la función lineal real  $\phi$  [21]. Comenzando con el denominador de la ecuación (3.1)

$$\begin{aligned}
\int \phi^* \phi d\tau &= \int \sum_{j=1}^n c_j f_j \sum_{k=1}^n c_k f_k d\tau, \\
&= \sum_j^n \sum_k^n c_j c_k \int f_j f_k d\tau, \\
&\equiv \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n c_j c_k S_{jk},
\end{aligned} \tag{3.4}$$

donde  $S_{jk}$  se define como la integral de traslape dada por

$$S_{jk} \equiv \int f_j^* f_k d\tau. \tag{3.5}$$

Teniendo en cuenta que  $S_{jk}$  no necesariamente es  $\delta_{jk}$  ya que no hay razón para suponer que las funciones  $f_j$  son mutuamente ortonormales. Ahora, trabajando con el numerador de (3.1)

$$\begin{aligned}
\int \phi^* \hat{H} \phi d\tau &= \int \sum_j^n c_j f_j \hat{H} \sum_k^n c_k f_k d\tau, \\
&= \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n c_j c_k \int f_j \hat{H} f_k d\tau, \\
&\equiv \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n c_j c_k H_{jk},
\end{aligned} \tag{3.6}$$

donde  $H_{jk}$  se define como

$$H_{jk} \equiv \int f_j^* \hat{H} f_k d\tau. \tag{3.7}$$

La integral variacional es

$$W \equiv \frac{\int \phi^* \hat{H} \phi d\tau}{\int \phi^* \phi d\tau} = \frac{\sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n c_j c_k H_{jk}}{\sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n c_j c_k S_{jk}}, \quad (3.8)$$

$$W \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n c_j c_k S_{jk} = \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n c_j c_k H_{jk}. \quad (3.9)$$

Ahora, minimizamos  $W$  para acercarnos a  $E_1$  como sea posible. Como la integral variacional  $W$  es una función de varias variables,  $W = W(c_1, c_2, \dots, c_n)$ , entonces, una condición necesaria para un mínimo es que sus derivadas parciales con respecto a cada una de las variables deben ser cero en el mínimo

$$\frac{\partial W}{\partial c_i} = 0 \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (3.10)$$

Al derivar (3.9) parcialmente con respecto a cada  $c_i$  con  $i = 1, 2, \dots, n$ , obtenemos  $n$  ecuaciones:

$$\frac{\partial W}{\partial c_i} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n c_j c_k S_{jk} + W \frac{\partial}{\partial c_i} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n c_j c_k S_{jk} = \frac{\partial}{\partial c_i} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n c_j c_k H_{jk}. \quad (3.11)$$

Trabajando con el segundo término del lado izquierdo de la expresión previa

$$\frac{\partial}{\partial c_i} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n c_j c_k S_{jk} = \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \left[ \frac{\partial}{\partial c_i} (c_j c_k) \right] S_{jk} = \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \left( c_k \frac{\partial c_j}{\partial c_i} + c_j \frac{\partial c_k}{\partial c_i} \right) S_{jk},$$

como las variables  $c_j$ 's son independientes, tenemos que

$$\frac{\partial c_j}{\partial c_i} = \delta_{ij} \quad (3.12)$$

entonces

$$\frac{\partial}{\partial c_i} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n c_j c_k S_{jk} = \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^n c_k \delta_{ij} S_{jk} + \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n c_j \delta_{ik} S_{jk}.$$

Al evaluar una de las sumas en cada suma doble del lado derecho

$$\frac{\partial}{\partial c_i} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n c_j c_k S_{jk} = \sum_{k=1}^n c_k S_{ik} + \sum_{j=1}^n c_j S_{ji},$$

recordando que estamos trabajando con funciones reales por lo que

$$S_{ji} = S_{ij}^* = S_{ij}, \quad (3.13)$$

y haciendo uso que el índice  $j$  es mudo entonces tenemos lo siguiente

$$\frac{\partial}{\partial c_i} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n c_j c_k S_{jk} = \sum_{k=1}^n c_k S_{ik} + \sum_{j=1}^n c_j S_{ij} = \sum_{k=1}^n c_k S_{ik} + \sum_{k=1}^n c_k S_{ik} = 2 \sum_{k=1}^n c_k S_{ik}. \quad (3.14)$$

Si reemplazamos  $S_{jk}$  por  $H_{jk}$  en cada uno de los desarrollos anteriores, se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial c_i} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n c_j c_k H_{jk} = 2 \sum_{k=1}^n c_k H_{ik}, \quad (3.15)$$

éste hecho depende de que

$$H_{ji} = H_{ij}^* = H_{ij}, \quad (3.16)$$

lo cual es cierto ya que  $\hat{H}$  es un operador hermitiano,  $f_i$  y  $f_j$  son reales.

Sustituyendo (3.10), (3.14) y (3.15) en (3.11) se tiene

$$2W \sum_{k=1}^n c_k S_{ik} = 2 \sum_{k=1}^n c_k H_{ik}, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

simplificando

$$\sum_{k=1}^n [(H_{ik} - S_{ik} W) c_k] = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (3.17)$$

Esta última ecuación es un conjunto de  $n$  ecuaciones lineales homogéneas simultáneas en las variables  $c_1, c_2, \dots, c_n$  desconocidas, correspondientes a los coeficientes de la función variacional de prueba (3.3). En el caso general, cuando se tienen  $n$  funciones,  $f_1, \dots, f_n$ , la ecuación (3.17) se escribe como sigue



$$\begin{aligned}
(H_{11} - S_{11}W) c_1 &+ (H_{12} - S_{12}W) c_2 + \cdots + (H_{1n} - S_{1n}W) c_n = 0, \\
(H_{21} - S_{21}W) c_1 &+ (H_{22} - S_{22}W) c_2 + \cdots + (H_{2n} - S_{2n}W) c_n = 0, \\
\cdot &\quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdots \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\
\cdot &\quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdots \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\
\cdot &\quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdots \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\
(H_{n1} - S_{n1}W) c_1 &+ (H_{n2} - S_{n2}W) c_2 + \cdots + (H_{nn} - S_{nn}W) c_n = 0.
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Para que la solución del sistema de ecuaciones (3.18) no sea la trivial, requerimos que

$$\det(\mathbf{H} - W\mathbf{S}) = 0, \tag{3.19}$$

esto es,

$$\begin{vmatrix}
H_{11} - S_{11}W & H_{12} - S_{12}W & \cdots & H_{1n} - S_{1n}W \\
H_{21} - S_{21}W & H_{22} - S_{22}W & \cdots & H_{2n} - S_{2n}W \\
\cdot & \cdot & \cdots & \cdot \\
\cdot & \cdot & \cdots & \cdot \\
\cdot & \cdot & \cdots & \cdot \\
H_{n1} - S_{n1}W & H_{n2} - S_{n2}W & \cdots & H_{nn} - S_{nn}W
\end{vmatrix} = 0. \tag{3.20}$$

Con esto obtenemos una ecuación algebraica de grado  $n$  en la variable  $W$ . Esta ecuación tiene  $n$  raíces, si las ordenamos de menor a mayor tenemos,

$$W_1 \leq W_2 \leq \cdots \leq W_n.$$

Si numeramos los estados del sistema en orden de energía creciente, tenemos que

$$E_1 \leq E_2 \leq \cdots \leq E_n \leq E_{n+1} \leq \cdots,$$

donde  $E_n$  es la energía exacta del estado  $n$ . Del teorema de variación conocemos que

$$E_1 \leq W_1, \quad E_2 \leq W_2, \quad E_3 \leq W_3, \quad \dots, \quad E_n \leq W_n. \tag{3.21}$$

Así, el método variacional lineal provee una cota superior para la energía de los  $n$  estados más bajos del sistema en estudio. Si queremos aproximaciones de las energías de más estados excitados, lo que hay que hacer es agregar más funciones  $f_k$  a la función variacional de prueba  $\phi$ . Además, el hecho de aumentar el número de funciones

en la función de prueba, puede aumentar la precisión de la energías calculadas. Si las funciones  $f_k$  en  $\phi = \sum_k c_k f_k$  forman un conjunto completo, podríamos obtener la función de onda exacta, desafortunadamente necesitamos un número infinito de funciones, por tal motivo, la función de onda es solamente una aproximación. Como se ha venido planteando en el desarrollo de este método aproximado, el problema se reduce a resolver la ecuación secular (3.20) y las ecuaciones lineales asociadas (3.18), una forma eficiente es utilizar el método matricial.

Para el caso de la aproximación de la función de onda del estado base, tomamos la raíz más baja  $W_1$  de la ecuación secular, y la sustituimos en el conjunto de ecuaciones (3.18). Entonces se procede a resolver el sistema de ecuaciones para obtener los coeficientes  $c_1^1, c_2^1, \dots, c_n^1$ , donde el superíndice <sup>1</sup> indica que esos coeficientes corresponden a  $W_1$ . Una vez determinados los coeficientes  $c_k^1$ , tomamos a  $\phi = \sum_k c_k^1 f_k$  como la función de onda aproximada del estado base. Así, al utilizar raíces más altas de la ecuación secular en la ecuación (3.18) obtenemos las funciones de onda aproximadas de estados excitados.

La solución de las ecuaciones (3.20) y (3.18) se pueden simplificar en gran medida anulando algunas integrales. Si elegimos a las funciones  $f_k$  como aquellas funciones propias de un operador  $\hat{A}$  tal que este operador conmute con el operador  $\hat{H}$ , estamos haciendo que se anulen algunos elementos de  $\mathbf{H}$  fuera de la diagonal. Además, si las funciones  $f_k$  son funciones ortonormales, todos los elementos no diagonales de  $\mathbf{S}$  también se anulan. Cabe aclarar que las ecuaciones (3.18) y (3.20) siguen siendo válidas aún eliminando la restricción de que la función variacional sea real [21].



# Capítulo 4

## Partícula libre en una caja impenetrable

### 4.1. Partícula libre en una caja unidimensional

El problema de la partícula libre en una caja unidimensional se estudia en muchos libros de texto de Mecánica Cuántica [22], [23], [24] en el que se considera una partícula de masa  $m$  confinada por el potencial  $V(x)$  de la forma

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x| < a \\ \infty & \text{si } |x| \geq a \end{cases}, \quad (4.1)$$

el cual, modela una caja de paredes impenetrables de ancho  $2a$ . La ecuación de Schrödinger del sistema escrita en unidades naturales ( $m = \hbar = 1$ ), es la siguiente

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + 2(E - V)\psi = 0. \quad (4.2)$$

Debido a la forma del potencial, el cual es infinito fuera de la caja, la función de onda queda concentrada únicamente dentro de la caja, y el problema se reduce exactamente al problema de la partícula libre, cuya solución es de la forma

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (4.3)$$

donde

$$k = 2E > 0. \quad (4.4)$$

Aplicando la condición de frontera a la ecuación (4.3), es decir, nuestra función de onda debe de anularse en las paredes de la caja

$$\psi(-a) = \psi(a) = 0, \quad (4.5)$$

obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{pmatrix} e^{-ika} & e^{ika} \\ e^{ika} & e^{-ika} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.6)$$

Para que la solución no sea la trivial, el determinante debe anularse, es decir

$$e^{-2ika} - e^{2ika} = 0,$$

o lo que es lo mismo

$$-2i \operatorname{sen}(2ka) = 0.$$

Para esto, se debe satisfacer que

$$k = \frac{n\pi}{2a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.7)$$

Sustituyendo la ecuación (4.7) en la primera ecuación de (4.6) y luego multiplicando por  $e^{\frac{i\pi n}{2}}$  se llega a lo siguiente

$$A + Be^{in\pi} = 0,$$

pero  $e^{in\pi} = (-1)^n$ , con esto obtenemos dos soluciones diferentes; una para cuando  $n$  es par en la que  $A = -B$  mientras que para  $n$  impar  $A = B$ .

Entonces, la solución para estados con paridad par es la siguiente

$$\psi = 2B \cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) = B_2 \cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right),$$

mientras que para los estados con paridad impar la solución es

$$\psi = -2B \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) = B_1 \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{2a}\right).$$

Normalizando nuestras soluciones obtenemos que las constantes de normalización son las misma para ambas soluciones, esto es,

$$B_1 = B_2 = \sqrt{\frac{1}{a}}.$$

Con esto, escribimos nuestras funciones de onda para estados pares e impares de la partícula en una caja unidimensional de paredes impenetrables denotados por + y -, respectivamente.

$$\psi_n^+ = \sqrt{\frac{1}{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (4.8)$$

y

$$\psi_n^- = \sqrt{\frac{1}{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (4.9)$$

Para obtener la expresión de la energía de la partícula, igualamos las expresiones para  $k$  dadas por las ecuaciones (4.4) y (4.7)

$$2E = \frac{n^2 \pi^2}{4a^2},$$

por tanto, la energía de una partícula confinada en una caja unidimensional, de ancho  $2a$  y de paredes impenetrables, está dada por

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2}{8a^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.10)$$

## 4.2. Partícula libre en una caja circular

En esta sección nos enfocamos a estudiar con detalle el problema de la partícula confinada a moverse en el interior de una caja circular de paredes impenetrables, ya que este modelo es de gran utilidad para la realización de este trabajo. Además, una de las aplicaciones de este modelo se encuentra en el estudio del espectro de energías de un átomo hidrogenoide bidimensional confinado en una caja circular [25], [26].

Consideramos una partícula de masa  $\mu$  que se mueve en el interior de una caja circular de radio  $\rho_0$ , como se muestra en la siguiente figura.

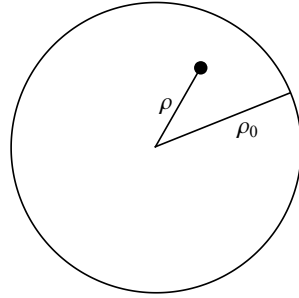


Figura 4.1: Partícula de masa  $\mu$  confinada dentro de una caja circular impenetrable de radio  $\rho_0$ .

Las paredes impenetrables de la caja están descritas por el siguiente potencial

$$V(\rho) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 \leq \rho \leq \rho_0 \\ \infty & \text{si } \rho > \rho_0 \end{cases}. \quad (4.11)$$

Para plantear la ecuación de Schrödinger del problema, consideramos que el hamiltoniano del sistema es el siguiente:

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + V(\rho), \quad (4.12)$$

donde  $\vec{p}$  es el momento lineal de la partícula; así, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi = E\psi.$$

Escribiendo el operador laplaciano en coordenadas polares

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2},$$

la ecuación de Schrödinger queda escrita de la siguiente manera

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \psi(\rho, \phi) = E\psi(\rho, \phi). \quad (4.13)$$

Para resolver esta ecuación, utilizamos el método de separación de variables, en que la solución se propone como

$$\psi(\rho, \phi) = R(\rho)\Phi(\phi). \quad (4.14)$$

Debido a la forma del potencial, la función de onda está sujeta a la siguiente condición de frontera

$$\psi(\rho = \rho_0, \phi) = 0, \quad (4.15)$$

es decir, se debe anular fuera de la caja.

Sustituyendo la solución propuesta, ecuación (4.14), se tiene

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} R(\rho)\Phi(\phi) \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} R(\rho)\Phi(\phi) \right) = ER(\rho)\Phi(\phi),$$

multiplicando por  $\frac{1}{R(\rho)\Phi(\phi)}$  y como  $R$  solamente depende de  $\rho$  y  $\Phi$  de  $\phi$ , en lugar de las derivadas parciales tendremos las derivadas totales

$$\frac{1}{\rho R(\rho)} \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{d}{d\rho} R(\rho) \right) + \frac{1}{\Phi(\phi)\rho^2} \frac{d^2}{d\phi^2} \Phi(\phi) = -\frac{2\mu E}{\hbar^2}. \quad (4.16)$$

Sea

$$k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}, \quad (4.17)$$

multiplicando por  $\rho^2$  a la ecuación (4.16) y considerando a  $m^2$  como la constante de separación, tenemos lo siguiente:

$$\frac{\rho}{R(\rho)} \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{d}{d\rho} R(\rho) \right) + k^2 \rho^2 = -\frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{d^2}{d\phi^2} \Phi(\phi) = m^2,$$

entonces,

$$\frac{d^2}{d\phi^2} \Phi(\phi) = -m^2 \Phi(\phi), \quad (4.18)$$

$$\rho \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{d}{d\rho} R(\rho) \right) = -(k^2 \rho^2 - m^2) R(\rho). \quad (4.19)$$

De aquí, nuestro problema se reduce a resolver las ecuaciones (4.18) y (4.19) que corresponden a la parte angular y radial, respectivamente.



Comenzando con (4.18)

$$\frac{d^2}{d\phi^2}\Phi(\phi) + m^2\Phi(\phi) = 0,$$

para que  $\psi(\rho, \phi)$  sea periódica en la coordenada  $\phi$ , es decir pedimos que  $\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi)$ , la constante de separación debe tomar ciertos valores [27], entonces, la solución es de la forma

$$\Phi_m(\phi) = Ae^{im\phi} \quad \text{para} \quad |m| = 0, 1, 2, 3, \dots,$$

donde,  $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ , es la constante de normalización, por lo que,

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}. \quad (4.20)$$

Estas soluciones son eigenestados del operador de momento angular  $\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$  con eigenvalores  $m\hbar$ .

Ahora, nos enfocamos en resolver la parte radial, que corresponde a la ecuación (4.19) que también la podemos escribir como

$$\rho^2 \frac{d^2}{d\rho^2}R(\rho) + \rho \frac{d}{d\rho}R(\rho) + (k^2\rho^2 - m^2)R(\rho) = 0. \quad (4.21)$$

Haciendo  $r = k\rho$ , podemos ver que se trata de la ecuación diferencial de Bessel [28]

$$r^2 \frac{d^2R}{dr^2} + r \frac{dR}{dr} + (r^2 - m^2)R = 0$$

cuya solución es

$$R_m(r) = CJ_m(r) + DY_m(r)$$

donde  $J_m(r)$  son las funciones de Bessel de primera clase de orden  $m$ , estas funciones son finitas en el origen, mientras que  $Y_m(r)$  son las funciones de Bessel de segunda clase de orden  $m$  las cuales divergen en el origen (ver Figura 4.2);  $C$  y  $D$  son constantes que se determinan mediante la condición de normalización. Como nuestro análisis incluye el origen, entonces  $D = 0$ . Con esto, la solución que buscamos es

$$R_m(k\rho) = CJ_m(k\rho). \quad (4.22)$$

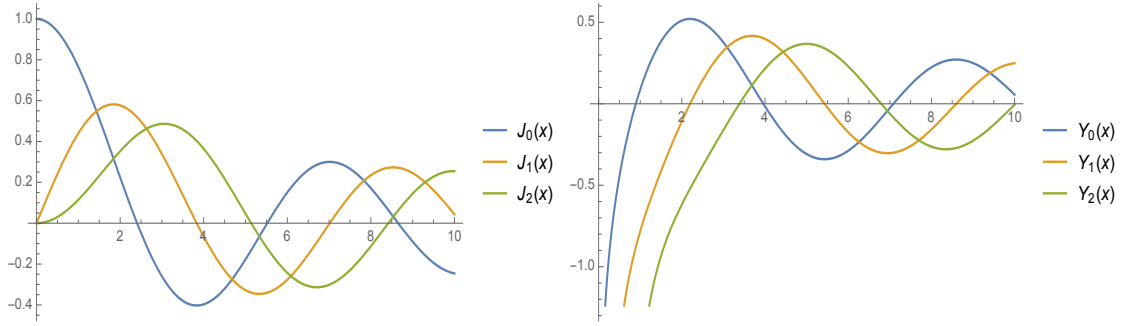


Figura 4.2: Gráficas de las funciones de Bessel. Del lado izquierdo, se muestran las funciones de primera clase, como se observa, son finitas en el origen; mientras que del lado derecho, se muestran las funciones de Bessel de segunda clase, las cuales divergen en el origen.

Aplicando la condición de frontera  $\psi(\rho = \rho_0, \phi) = 0$ ,

$$R_m(k\rho_0) = C J_m(k\rho_0) = 0.$$

Para que esta condición se cumpla, se requiere que  $k\rho_0$  sea alguno de los ceros de la función de Bessel. Sea  $X_{nm}$  el n-ésimo cero de  $J_m(k\rho_0)$ , entonces para cada  $X_{nm}$  hay un valor de  $k$  denotado por  $k_{nm}$ , así

$$k_{nm}\rho_0 = X_{nm} \implies k_{nm} = \frac{X_{nm}}{\rho_0}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad |m| = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (4.23)$$

por tanto

$$J_m(k\rho) = J_m\left(X_{nm} \frac{\rho}{\rho_0}\right) \implies R_{nm}\left(X_{nm} \frac{\rho}{\rho_0}\right) = C_{nm} J_m(k_{nm}\rho). \quad (4.24)$$

Así, nuestra solución es

$$\psi_{nm}(\rho, \phi) = C_{nm} J_m(k_{nm}\rho) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \quad (4.25)$$

donde  $C_{nm}$  es la constante de normalización, cuyo cálculo se muestra en el Apéndice A,

$$C_{nm} = \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{m+1}(X_{nm})}. \quad (4.26)$$

Para conocer los eigenvalores de energía de la partícula confinada en la caja circular, usamos las ecuaciones (4.17) y (4.23), como  $k = k_{nm}$  entonces  $E = E_{nm}$ , por lo

que

$$E_{nm} = \frac{\hbar^2 X_{nm}^2}{2\mu\rho_0^2}.$$

Estos niveles de energía están doblemente degenerados para  $m \neq 0$ , esto es debido a los dos valores equivalentes de  $\pm|m|$ , los cuales corresponden al movimiento en sentido horario y antihorario [29], respectivamente. La explicación matemática es debido a que tanto  $J_m$  como  $J_{-m}$  tienen los mismos ceros,  $X_{nm} = X_{n-m} = X_{n|m|}$  para  $m$  entero, por tanto, las energías y funciones propias del sistema están dadas por

$$E_{nm} = \frac{\hbar^2 X_{n|m|}^2}{2\mu\rho_0^2}. \quad (4.27)$$

$$\psi_{nm}(\rho, \phi) = \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}\left(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}. \quad (4.28)$$

Como nuestras funciones de onda son funciones complejas, excepto para  $m = 0$ . Entonces, para visualizar la representación gráfica de las funciones de onda, lo que hacemos es una combinación lineal de los estados con  $m \neq 0$ . Al realizar la combinación de los estados, ecuación (4.28), para los casos doblemente degenerados  $m = \pm|m|$ , utilizamos la relación de Euler,

$$e^{\pm im\phi} = \cos(m\phi) \pm i \operatorname{sen}(m\phi), \quad (4.29)$$

de la cual se obtiene que

$$\cos(m\phi) = \frac{e^{im\phi} + e^{-im\phi}}{2} \quad \text{y} \quad \operatorname{sen}(m\phi) = \frac{e^{im\phi} - e^{-im\phi}}{2i}. \quad (4.30)$$

De aquí que las combinaciones lineales de los estados degenerados las expresamos como

$$\psi_{nm}^{\pm}(\rho, \phi) = \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}\left(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (e^{im\phi} \pm e^{-im\phi}).$$

Al efectuar la suma se tiene lo siguiente

$$\psi_{nm}^{+}(\rho, \phi) = \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}\left(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} 2\cos(m\phi), \quad (4.31)$$

en cambio, al realizar la resta se obtiene

$$\psi_{nm}^-(\rho, \phi) = \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} 2i \text{sen}(m\phi). \quad (4.32)$$

Como ahora la expresión para la función de onda está dada, ya sea como una suma o resta de los estados degenerados, necesitamos normalizar nuevamente nuestra función de onda, lo cual se reduce a normalizar únicamente la parte angular. Al realizar dicha normalización se obtiene lo siguiente:

$$\psi_{nm}^+(\rho, \phi) = \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}) \frac{1}{\sqrt{2}} \cos(m\phi) \quad (4.33)$$

y

$$\psi_{nm}^-(\rho, \phi) = \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}) \frac{1}{\sqrt{2}} \text{sen}(m\phi). \quad (4.34)$$

A continuación se muestran las gráficas (Figura 4.3) para algunas de las funciones de onda  $\psi_{nm}(\rho, \phi)$  en una región circular de radio  $\rho_0 = 1.5$  para tres diferentes valores del número cuántico principal  $n$  y momento angular cero; donde  $n$ , lo escribimos de la forma  $n = n_r + 1$ , así  $n_r$  contabiliza el número de nodos radiales,  $n_r = 0, 1, 2, \dots$

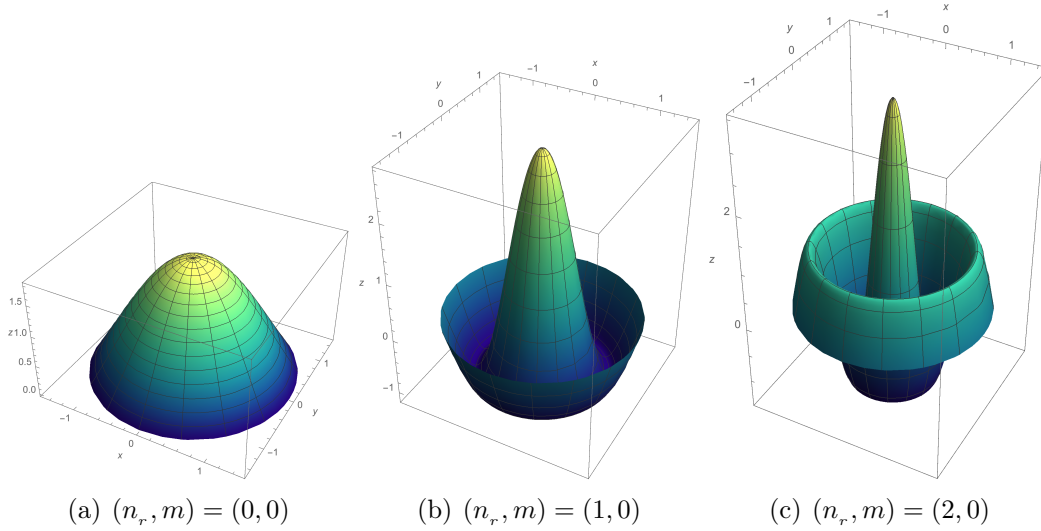


Figura 4.3: Gráficas de las funciones de onda  $\psi_{nm}(\rho, \phi)$  para el estado base y dos estados excitados radialmente.

La siguiente figura corresponde a las gráficas de  $|\psi_{nm}^\pm(\rho, \phi)|^2$ , en la cual se visualiza la doble degeneración para  $|m| = 1$ . En la Figura 4.4(a) se muestra la suma del estado doblemente degenerado mientras que la Figura 4.4(b) corresponde a la resta de dichos estados.

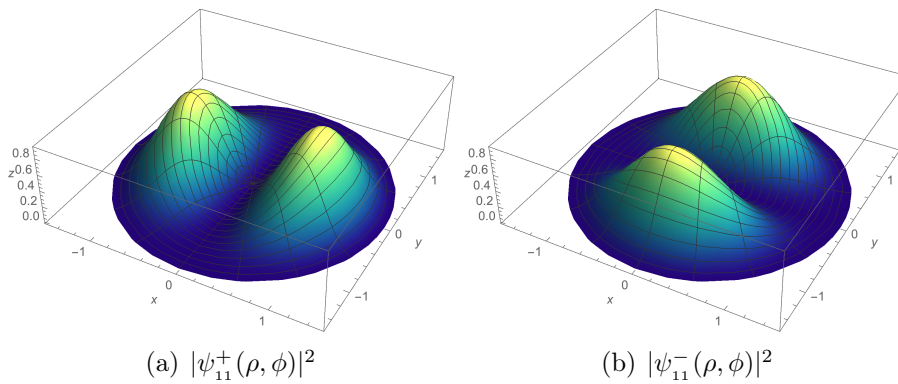


Figura 4.4: Gráfica de  $|\psi_{11}^+(\rho, \phi)|^2$  y  $|\psi_{11}^-(\rho, \phi)|^2$  como combinación lineal de los estados degenerados para el caso  $|m| = 1$  y  $n_r = 0$ .

Las siguientes gráficas corresponden al módulo cuadrado de las funciones de onda  $\psi_{nm}(\rho, \phi)$  (Figura 4.5) y  $|\psi_{nm}^+(\rho, \phi)|^2$  (Figuras 4.6 y 4.7) para estados radiales y angulares.

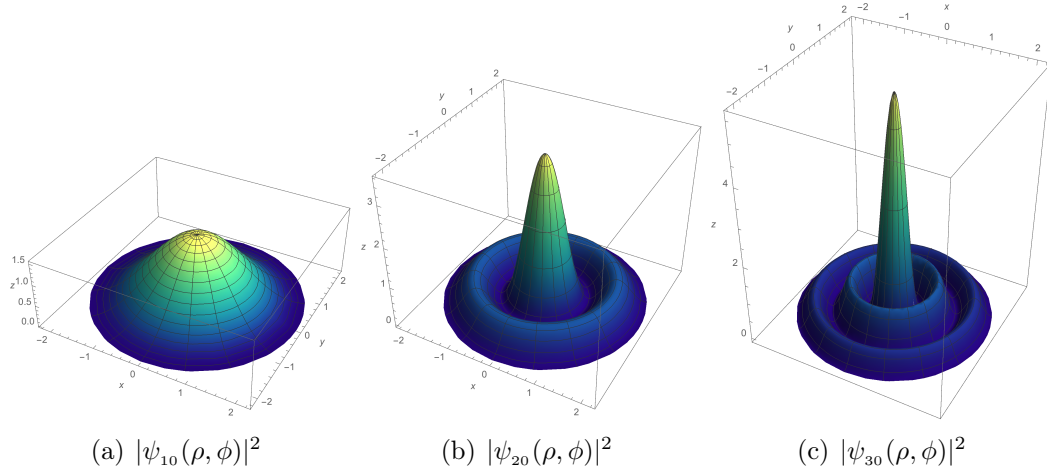


Figura 4.5: Gráficas de la densidad de probabilidad  $|\psi_{nm}(\rho, \phi)|^2$  para el estado base y dos estados radialmente excitados sin momento angular, para una región circular de radio  $\rho_0 = 2.2$ .

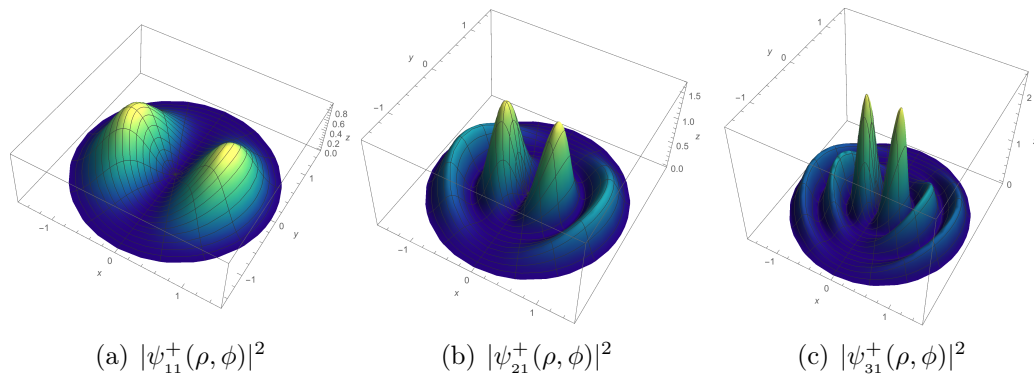


Figura 4.6: Gráficas de la densidad de probabilidad  $|\psi_{nm}^+(\rho, \phi)|^2$  con  $|m| = 1$  para una región circular de radio  $\rho_0 = 1.5$ .

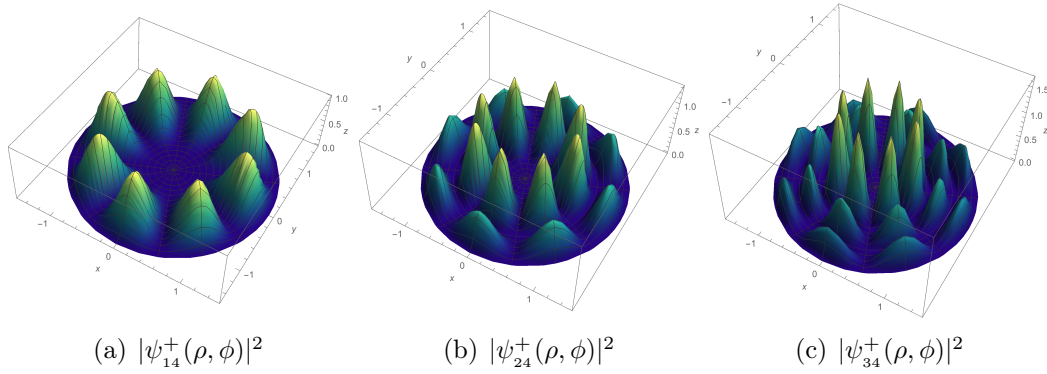


Figura 4.7: Gráficas de la densidad de probabilidad  $|\psi_{nm}^+(\rho, \phi)|^2$  con el número cuántico de momento angular  $|m| = 4$  y un radio  $\rho_0 = 1.5$ .

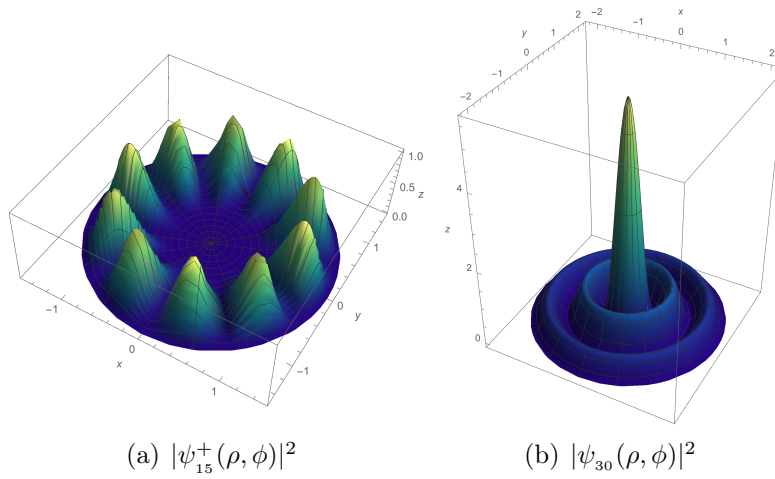


Figura 4.8: Gráficas de  $|\psi_{15}^+(\rho, \phi)|^2$  y  $|\psi_{30}(\rho, \phi)|^2$ . En (a), se muestra un estado únicamente con momento angular y cero nodos radiales mientras que en (b) se trata de un estado radialmente excitado con momento angular cero.

En la figura 4.8 se muestran las gráficas de dos estados totalmente diferentes, sin embargo, las energías de ambos estados no difieren en gran cantidad. Este hecho se debe a que los ceros  $X_{n|m|}$  que consideramos son:  $X_{1,5} = 8.77148$  y  $X_{3,0} = 8.65373$ , respectivamente; como podemos observar, son valores muy cercanos entre sí.

# Capítulo 5

## El oscilador armónico confinado en una dimensión

En este capítulo se aborda el problema del OAUC en una caja de paredes impenetrables. Se obtienen los eigenvalores de energía mediante dos métodos de aproximación: teoría de perturbaciones independiente del tiempo y el método variacional lineal. Se realiza la comparación de los valores de energía obtenidos mediante los métodos aproximados y los obtenidos con la solución exacta; así como también, la comparación entre los valores propios de energía obtenidos con el método variacional lineal y los ya reportados en la literatura obtenidos mediante el mismo método. Además, se obtiene la representación gráfica de las funciones de onda construidas a partir del método variacional lineal.

### 5.1. Teoría de perturbaciones independiente del tiempo

La teoría de perturbaciones es un procedimiento sistemático para la obtención de soluciones aproximadas de un sistema que involucra el hamiltoniano de un sistema sin perturbar, mas un hamiltoniano perturbante; la solución del sistema se construye a partir de las soluciones exactas conocidas del sistema sin perturbar.

Para ello, escribimos el hamiltoniano total del sistema de la siguiente forma

$$H = H_0 + \lambda H', \tag{5.1}$$



donde,  $H_0$  es el hamiltoniano de un sistema conocido, cuya energía asociada es  $E_n^0$ ,  $\lambda$  es un parámetro que puede tomar valores muy pequeños e incluso puede considerarse como la unidad [23] y a  $H'$  se le conoce como la perturbación del sistema.

Las eigenfunciones y las energías propias del hamiltoniano total las podemos escribir como

$$\psi_n = \psi_n^0 + \lambda\psi_n^1 + \lambda^2\psi_n^2 + \dots, \quad (5.2)$$

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots \quad (5.3)$$

Considerando la aproximación a primer orden y por comodidad usamos  $\lambda = 1$ , tenemos que los eigenvalores de la energía están dados por

$$E_n = E_n^0 + E_n^1, \quad (5.4)$$

donde

$$E_n^1 = \langle \psi_n^0 | H' | \psi_n^0 \rangle, \quad (5.5)$$

mientras que la corrección a primer orden de la función de onda, la podemos expresar como una combinación lineal de las funciones de onda del sistema sin perturbar, puesto que estas funciones de onda constituyen un conjunto completo, entonces

$$\psi_n^1 = \sum_{m \neq n} C_m^n \psi_m^0, \quad (5.6)$$

donde

$$C_m^n = \frac{\langle \psi_m^0 | H' | \psi_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0}. \quad (5.7)$$

Una vez dada una pequeña introducción sobre la teoría de perturbaciones, procedemos a analizar el problema. Nuestro sistema en estudio es el modelo cuántico del OAUC por dos paredes impenetrables de potencial  $V$ , colocadas simétricamente a una distancia  $a$  con respecto al mínimo de potencial, tal como se muestra en la Figura 5.1.

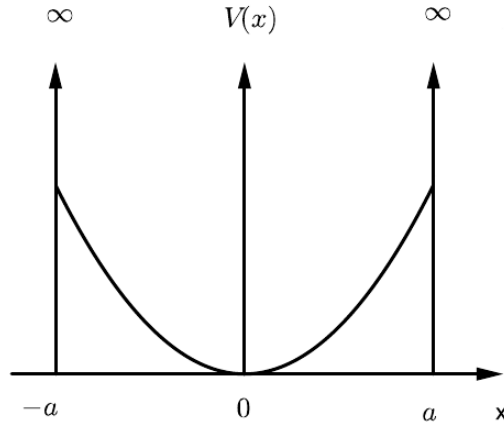


Figura 5.1: Potencial del oscilador armónico confinado simétricamente.

Utilizando unidades naturales  $\hbar = m = \omega = 1$ , escribimos el hamiltoniano del OAUC dentro de una caja localizada en el intervalo  $[-a, a]$  de la siguiente manera [12]

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) + \frac{1}{2} x^2, \quad (5.8)$$

el potencial de confinamiento  $V(x)$  está dado por

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x| < a \\ \infty & \text{si } |x| \geq a. \end{cases} \quad (5.9)$$

La ecuación de Schrödinger a resolver es

$$H\psi = E\psi. \quad (5.10)$$

Aquí, la distancia es medida en unidades de  $(\hbar/m\omega)^{1/2}$ , la energía en unidades de  $\hbar\omega$  y  $H$  es el hamiltoniano dado por la ecuación (5.8). La función de onda  $\psi$  está sujeta a la siguiente condición de frontera,

$$\psi(x = a) = \psi(x = -a) = 0. \quad (5.11)$$

Abordando el problema del cálculo de los eigenvalores de la energía mediante la teoría de perturbaciones, identificamos a  $H_0$  como

$$H_0 = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V(x),$$

como podemos ver, este hamiltoniano corresponde al de una partícula confinada por el potencial  $V(x)$  el cual modela una caja de paredes impenetrables. De acuerdo con la Sección 4.1, los eigenvalores de energía  $E_n^0$  y las funciones de onda  $\psi_n^0$  son ya conocidas. Por otra parte, el término

$$H' = \frac{1}{2}x^2,$$

es considerado como la perturbación que sufre el sistema conocido.

De la Sección 4.1 retomamos las ecuaciones (4.8), (4.9) y (4.10), correspondientes a los estados pares e impares  $\psi_n^0$  y energía  $E_n^0$ . Las funciones de onda para estados pares e impares de la partícula en una caja unidimensional de paredes impenetrables son

$$\psi_n^0 = \sqrt{\frac{1}{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (5.12)$$

y

$$\psi_n^0 = \sqrt{\frac{1}{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (5.13)$$

La expresión de la energía  $E_n^0$  es

$$E_n^0 = \frac{n^2 \pi^2}{8a^2}. \quad (5.14)$$

Ahora, procedemos a calcular la corrección a primer orden de la energía, dada por la ecuación (5.5). Al considerar la solución par

$$E_n^1 = \frac{1}{2a} \int_{-a}^a x^2 \cos^2\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) dx$$

integrando y evaluando en los límites de integración se obtiene que

$$E_n^1 = \frac{a^2}{6} - \frac{a^2}{n^2 \pi^2}.$$

Al calcular  $E_n^1$  pero ahora con los estados impares se llega a la misma expresión de arriba, por lo tanto, la expresión para  $E_n^1$  es válida para  $n = 1, 2, 3, \dots$

Con esto, la energía  $E_n$  de nuestro sistema calculada mediante la teoría de perturbaciones aproximada a primer orden la podemos escribir como

$$E_n = \frac{n^2\pi^2}{8a^2} + \frac{a^2}{6} - \frac{a^2}{n^2\pi^2}. \quad (5.15)$$

A continuación se muestra la tabla con algunos valores de las energías calculados mediante la teoría de perturbaciones. Estos cálculos se realizaron para distintos valores de  $a$  y el número cuántico principal  $n$ .

Tabla 5.1: Eigenvalores de energía del OAUC en una caja de tamaño  $2a$ . La unidad de longitud es  $(\hbar/m\omega)^{1/2}$  y la unidad de energía es  $\hbar\omega$ .

$n$	$a = 0.3$	$a = 0.5$	$a = 0.7$	$a = 1$	$a = 2$	$a = 3$
1	13.71366	4.95114	2.54978	1.29905	0.56981	0.72519
2	54.84386	19.77454	10.14028	5.07614	1.79905	1.82034
3	123.38404	44.45207	22.73596	11.25871	3.39746	2.63238
4	219.33897	78.99692	40.36266	19.89954	5.57614	3.63625
5	342.70923	123.41071	63.02359	31.00513	8.36108	4.89047
6	493.49497	177.69384	90.71951	44.57707	11.75871	6.40947
7	671.69622	241.84646	123.45071	60.61593	15.77123	8.19820
8	877.31303	315.86861	161.21729	79.12192	20.39954	10.25873
9	1110.34538	399.76033	204.01931	100.09516	25.64410	12.59205
10	1370.79330	493.52163	251.85679	123.53571	31.50513	15.19866
11	1658.65678	597.15252	304.72976	149.44360	37.98276	18.07888
12	1973.93582	710.65301	362.63822	177.81884	45.07707	21.23288
13	2316.63042	834.02309	425.58217	208.66146	52.78812	24.66076
14	2686.74060	967.26277	493.56163	241.97146	61.11593	28.36260
15	3084.26633	1110.37205	566.57660	277.74884	70.06052	32.33846
16	3509.20764	1263.35093	644.62707	315.99361	79.62192	36.58836

## 5.2. Método variacional lineal

De acuerdo con el método variacional lineal, abordado en la Sección 3.2, para obtener los eigenvalores de energía mediante este método, necesitamos construir una función de prueba  $\psi$ . Esta función de onda  $\psi$  de la ecuación (5.10) la expresamos en términos de un conjunto base ortonormal  $\{\phi_j\}$ , que son las eigenfunciones de onda de la partícula libre confinada en una caja unidimensional de ancho  $2a$ . Por tanto,

$$\psi = \sum_j^N c_j \phi_j, \quad (5.16)$$

donde las funciones base  $\phi_j$  se separan en estados pares e impares respectivamente dados de la siguiente forma

$$\phi_j^+ = \sqrt{\frac{1}{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) \quad n = 1, 3, 5, \dots, \quad (5.17)$$

$$\phi_j^- = \sqrt{\frac{1}{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (5.18)$$

Como el potencial en la ecuación (5.8) es una función simétrica de la posición, entonces también lo es el hamiltoniano  $H$ ; así, la ecuación de Schrödinger puede separarse en dos ecuaciones independientes, una que contiene las funciones de estado simétricas y la otra que contiene las funciones de estado antisimétricas [22]. Entonces, las soluciones  $\psi$  del OAUC tienen simetría definida, por lo tanto, si deseamos encontrar soluciones simétricas debemos utilizar funciones  $\phi_j$  simétricas en la ecuación (5.16) y viceversa.

Para resolver la ecuación de Schrödinger, ecuación (5.13), empleamos el método variacional lineal donde la función de onda aproximada  $\psi$  está dada por la expresión (5.16). Como  $\psi$  es lineal en los coeficientes  $c_j$  y el conjunto de funciones base  $\{\phi_j\}$  es un conjunto ortonormal, la solución al problema de eigenvalores es equivalente a encontrar la solución de la ecuación (3.18) reescrita de la siguiente forma

$$(\mathbf{H} - E\mathbf{I}) \vec{c} = 0, \quad (5.19)$$

donde  $\mathbf{H}$  es la matriz hamiltoniana del sistema,  $\mathbf{I}$  es la matriz identidad y  $\vec{c}_j$  es el vector de coeficientes  $\vec{c}_j = (c_1, c_2, c_3, \dots, c_N)$ . Los elementos de la matriz hamiltoniana están

dados por

$$H_{nm} = \langle \phi_n | H | \phi_m \rangle. \quad (5.20)$$

Como los estados tienen paridad definida, la expresión analítica para obtener los elementos de la matriz hamiltoniana se separan para estados pares e impares. Comenzando el cálculo para los estados pares, se tiene que los elementos de la diagonal están dados por

$$\begin{aligned} H_{nn} &= \int_{-a}^a \phi_n^*(x) H \phi_n(x) dx \\ &= \int_{-a}^a \sqrt{\frac{1}{a}} \cos\left(\frac{(2n-1)\pi x}{2a}\right) \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2\right) \sqrt{\frac{1}{a}} \cos\left(\frac{(2n-1)\pi x}{2a}\right) dx \\ &= \frac{(2n-1)^2 \pi^2}{8a^3} \int_{-a}^a \cos^2\left(\frac{(2n-1)\pi x}{2a}\right) dx \\ &\quad + \frac{1}{2a} \int_{-a}^a x^2 \cos^2\left(\frac{(2n-1)\pi x}{2a}\right) dx \end{aligned} \quad (5.21)$$

mientras que para los elementos fuera de la diagonal tenemos

$$\begin{aligned} H_{nm} &= \int_{-a}^a \phi_n^*(x) H \phi_m(x) dx \\ &= \frac{(2m-1)^2 \pi^2}{8a^3} \int_{-a}^a \cos\left(\frac{(2n-1)\pi x}{2a}\right) \cos\left(\frac{(2m-1)\pi x}{2a}\right) dx \\ &\quad + \frac{1}{2a} \int_{-a}^a x^2 \cos\left(\frac{(2n-1)\pi x}{2a}\right) \cos\left(\frac{(2m-1)\pi x}{2a}\right) dx \end{aligned} \quad (5.22)$$

calculando las integrales en (5.21) y (5.22) obtenemos

$$H_{nm} = \begin{cases} \frac{(2n-1)^2 \pi^2}{8a^3} + \frac{a^2(-6+(1-2n)^2 \pi^2)}{6(\pi-2n\pi)^2}, & \text{si } m = n \\ \frac{a^2(-1)^{m+n}}{\pi^2} \left( \frac{1}{(m-n)^2} - \frac{1}{(-1+m+n)^2} \right), & \text{si } m \neq n, n, m = 1, 2, 3, \dots \end{cases} \quad (5.23)$$

Al realizar los cálculos para los estados impares descritos por la función de onda

$$\phi_j^- = \sqrt{\frac{1}{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

se obtiene que los elementos de matriz son

$$H_{nm} = \begin{cases} \frac{n^2\pi^2}{2a^2} + \frac{a^2}{12} \left(2 - \frac{3}{n^2\pi^2}\right), & \text{si } m = n \\ \frac{4a^2mn(-1)^{m+n}}{(m-n)^2(m+n)^2\pi^2}, & \text{si } m \neq n, n, m = 1, 2, 3, \dots \end{cases} \quad (5.24)$$

Para conocer los eigenvalores de energía lo que se hace es diagonalizar la matriz hamiltoniana cuyo tamaño depende del número de funciones base que estemos considerando.

### 5.2.1. Valores propios de la energía

El problema del OAUC en una caja de paredes impenetrables ya ha sido resuelto por diversos autores [1], [10], [11] lo cual, nos permitió hacer una comparación de los resultados obtenidos con los ya reportados mediante el mismo método en la referencia [1]. Los resultados obtenidos tienen una mejora en la precisión de los valores de energía; ésto se debe a que hoy en día los sistemas computacionales han tenido grandes avances en cuanto a eficiencia y precisión comparado con tiempo atrás. Adicionalmente, los cálculos realizados con doble precisión en las variables manejadas involucra únicamente 16 cifras decimales, mientras que nosotros en el programa de Mathematica le indicamos trabajar con variables de 25 cifras decimales.

En la Tabla 5.2, se muestran los resultados de las energías para el estado base, así como también, para distintos estados excitados con paridad par e impar, obtenidos mediante el método variacional lineal, diagonalizando la matriz hamiltoniana utilizando el software Mathematica. Para la obtención de estos resultados se consideraron como funciones base a las funciones de onda de la partícula confinada en una caja de ancho  $2a$ . Estos resultados se obtuvieron utilizando el mismo número de funciones base utilizadas en [1],  $N = 35$ .

Tabla 5.2: Energías para diferentes estados  $n$  del OAUC en cajas de distintos tamaños  $a$ , para los resultados obtenidos en este trabajo y los reportados en la referencia [1], se utilizó una base de 35 funciones.

$n$	Presente trabajo	Referencia [1]	Presente trabajo	Referencia [1]
	<b><math>a = 0.5</math></b>		<b><math>a = 1</math></b>	
1	4.951129323254131	4.951129323264	1.298459832032074	1.298459831928
2	19.774534179208319	19.774534178560	5.075582015226848	5.075582014976
3	44.452073829740951	44.452073828864	11.258825781483075	11.258825780608
4	78.996921150747461	78.996921150976	19.899696501830355	19.8996964993
5	123.410710456255095	123.410710456832	31.005254506370068	31.00525450
6	177.693843818557789	177.693843822080	44.577171228134119	44.5771712271
7	241.846458765661337	241.846458758144	60.616003727371578	60.61600372
8	315.868612686258065	315.868612673536	79.121980853572953	79.1219808506
9	399.760332979117221	399.760332976128	100.095210789445015	100.09521078
10	493.521634068787858	493.521634054144	123.535750114017713	123.53575010
11	597.152524136530702	597.152524107776	149.443630769243991	149.44363075
12	710.653008103264018	710.653008064512	177.818871903192415	177.81887188
13	834.023089073029655	834.023089029120	208.661485563741913	208.66148554
14	967.262769082354721	967.262768984064	241.971479640052666	241.97147961
15	1110.372049512326977	1110.372049494016	277.748859474087044	277.7488594
16	1263.350931326357989	1263.350931234816	315.993628787725820	315.9936287
17	1426.199415213081830	1426.199415111680	356.705790238696373	356.7057901
18	1598.917501675304757	1598.917501620224	399.885345765955819	399.8853457
19	1781.505191087087635	1781.505191022592	445.532296811010320	445.5322967
20	1973.962483731369757	1973.962483650560	493.646644463589652	493.6466444
	<b><math>a = 2</math></b>		<b><math>a = 3</math></b>	
1	0.537461209282187	0.53746120921	0.500391082930064	0.5003910828
2	1.764816438783295	1.764816438592	1.506081527256653	1.506081527088
3	3.399788241115702	3.399788240	2.541127259481277	2.541127258
4	5.584639079046173	5.5846390781	3.664219645106947	3.664219644
5	8.368874428282402	8.368874427	4.954180470927133	4.954180470
6	11.764982122303778	11.7649821209	6.473336616525056	6.473336615
7	15.776195799586868	15.776195797	8.252874650389063	8.252874649
8	20.403520683564297	20.403520681	10.303784986908151	10.303784984
9	25.647333722729998	25.64733371	12.629087157133280	12.62908715
10	31.507799347453825	31.50779934	15.229386203152752	15.22938619
11	37.984998143043909	37.98499813	18.104660952022933	18.1046609
12	45.078973327771767	45.07897332	21.254763574258408	21.25476356
13	52.789749784981233	52.78974977	24.679547456043381	24.6795474
14	61.117342681573451	61.11734267	28.378893607924940	28.37889360

Tabla 5.2: Continúa en la página siguiente



Continuación de la Tabla 5.2

n	Presente trabajo	Referencia [1]	Presente trabajo	Referencia [1]
15	70.061761703182868	70.0617616	32.352710835259477	32.3527108
16	79.623013278843871	79.6230132	36.600930344336839	36.6009303
17	89.801101817688530	89.8011018	41.123500258773698	41.1235002
18	100.596030428404153	100.5960304	45.920381210349580	45.9203811
19	112.007801356453683	112.0078013	50.991543059809349	50.9915430
20	124.036416257406372	124.0364162	56.336962495825175	56.3369624

Una vez que ya obtuvimos los eigenvalores de energía mediante los métodos aproximados, procedemos a realizar una comparación con los valores exactos de las energías. Para esto, retomamos la ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico unidimensional en el caso libre, escrita en unidades naturales está dada por,

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2\right) \psi(x) = E\psi(x). \quad (5.25)$$

La solución exacta de la ecuación (5.25) ya es conocida [30], ésta se obtiene en términos de la función hipergeométrica confluyente. Para ello consideramos a la función  $\psi(x)$  como,

$$\psi(x) = f(x)e^{-\frac{1}{2}x^2}, \quad (5.26)$$

donde la función  $f(x)$  satisface la siguiente ecuación diferencial

$$f''(x) - 2xf'(x) + (\mu - 1)f(x) = 0, \quad (5.27)$$

con  $\mu = 2E$ .

Haciendo el cambio de variable,  $s = x^2$  la ecuación 5.27 se transforma en

$$sf''(s) + \left(\frac{1}{2} - s\right)f'(s) - \frac{1}{4}(1 - \mu)f(s) = 0. \quad (5.28)$$

Esta expresión es la ecuación hipergeométrica confluyente, cuya solución general es,

$$f(x) = a {}_1F_1 \left[ \frac{1}{4}(1 - 2E); \frac{1}{2}; x^2 \right] + bx {}_1F_1 \left[ \frac{1}{4}(3 - 2E); \frac{3}{2}; x^2 \right], \quad (5.29)$$

donde  $a$  y  $b$  son constantes y  ${}_1F_1$  es la función hipergeométrica confluyente.

Debido a la simetría de la energía potencial, los eigenestados tienen paridad par e impar definida, denotados por el superíndice  $+$  y  $-$  respectivamente

$$\psi(x)^+ = Ae^{-\frac{1}{2}x^2} {}_1F_1 \left[ \frac{1}{4}(1 - 2E); \frac{1}{2}; x^2 \right], \quad (5.30a)$$

$$\psi(x)^- = Be^{-\frac{1}{2}x^2} x {}_1F_1 \left[ \frac{1}{4}(3 - 2E); \frac{3}{2}; x^2 \right], \quad (5.30b)$$

donde  $A$  y  $B$  son constantes.

Para evitar la divergencia de las funciones de onda cuando  $x \rightarrow \pm\infty$ , la función hipergeométrica debe ser finita, es decir, deben existir enteros no negativos  $n$  tales que

$$E = n + \frac{1}{2}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (5.31)$$

Por otra parte, la solución para el oscilador armónico unidimensional confinado en una caja de longitud  $2a$  ya es conocida [1], [31], [18]. Al considerar las condiciones de frontera del problema, dadas por la ecuación (5.11), obtenemos la cuantización de la energía. Para determinar estos eigenvalores de energía, es necesario encontrar las raíces sucesivas de las expresiones dadas por (5.32),

$${}_1F_1 \left[ \frac{1}{4}(1 - 2E); \frac{1}{2}; a^2 \right] = 0 \text{ para estados pares,} \quad (5.32a)$$

$${}_1F_1 \left[ \frac{1}{4}(3 - 2E); \frac{3}{2}; a^2 \right] = 0 \text{ para estados impares.} \quad (5.32b)$$

Los resultados numéricos se obtuvieron con Mathematica 9, los cuales se presentan del lado derecho en la Tabla 5.3. Al mismo tiempo, realizamos la comparación de estos resultados y los obtenidos mediante los métodos de aproximación. Las cifras que color azul son únicamente las que coinciden con el valor exacto, reportado en la tercer columna.

Tabla 5.3: Comparación de los valores propios de energía del OAUC mediante dos métodos aproximados y la solución exacta. La diagonalización en el método variacional se hizo usando  $N = 35$  funciones de la base de la partícula libre en una caja. Los resultados con teoría de perturbaciones son a primer orden.

n	Teoría de perturbaciones	Método variacional lineal	Método exacto
<b><math>a = 0.5</math></b>			
1	4.95114	4.951129323254131	4.95112932325413041
2	19.77454	19.774534179208319	19.77453417920831989
3	44.45207	44.452073829740951	44.45207382974095152
4	78.99692	78.996921150747461	78.99692115074746005
5	123.41071	123.410710456255095	123.41071045625508776
6	177.69384	177.693843818557789	177.69384381855777822
7	241.84646	241.846458765661337	241.84645876566132156
8	315.86861	315.868612686258065	315.86861268625809601
9	399.76033	399.760332979117221	399.76033297911720676
10	493.52163	493.521634068787858	493.52163406878788104
11	597.15252	597.152524136530702	597.15252413653070214
12	710.65301	710.653008103264018	710.65300810326396260
13	834.02309	834.023089073029655	834.02308907302969162
<b><math>a = 1</math></b>			
1	1.29905	1.298459832032074	1.29845983203205669
2	5.07614	5.075582015226848	5.07558201522678306
3	11.25871	11.258825781483055	11.25882578148291049
4	19.89954	19.899696501830355	19.89969650183008880
5	31.00513	31.005254506370068	31.00525450636960044
6	44.57707	44.577171228134119	44.57717122813350593
7	60.61593	60.616003727371578	60.61600372737064603
8	79.12192	79.121980853572953	79.12198085357183553
9	100.09516	100.09521078944502	100.09521078944343671
10	123.53571	123.53575011401771	123.53575011401591105
11	149.44360	149.44363076924399	149.44363076924155051
12	177.81884	177.81887190319241	177.81887190318972571
13	208.66146	208.66148556374191	208.66148556373835424
<b><math>a = 3</math></b>			
1	0.72519	0.500391082930064	0.50039108292974859
2	1.82034	1.506081527256653	1.50608152725279462
3	2.63238	2.541127259481277	2.54112725945709084
4	3.63625	3.664219645106947	3.66421964503489814
5	4.89047	4.954180470927133	4.95418047074573577
6	6.40947	6.473336616525056	6.47333661622940276
7	8.19820	8.252874650389063	8.25287464988038195
8	10.25873	10.303784986908151	10.30378498625218731
9	12.59205	12.629087157133280	12.62908715615689721
10	15.19866	15.229386203152752	15.22938620200942638
11	18.07888	18.104660952022933	18.10466095042970440
12	21.23288	21.254763574258408	21.25476357248378306
13	24.66076	24.679547456043381	24.67954745365878151

### 5.2.2. Funciones propias

Debido a que las funciones base que estamos considerando son funciones ortonormales, como ya se comentó en la Sección 3.2, el problema matricial se reduce en gran medida, puesto que ahora, las integrales de traslape  $S_{ij}$  son igual a  $\delta_{ij}$  es decir, son nulas para los elementos fuera de la diagonal, por tanto, la matriz  $\mathbf{S}$  se reduce a la matriz identidad  $\mathbf{I}$ , y nuestro problema matricial dado por la ecuación (3.19) se reduce a lo siguiente

$$\det(\mathbf{H} - W\mathbf{I}) = 0,$$

donde esta ecuación, produce un polinomio característico de la matriz hamiltoniana  $\mathbf{H}$ , este polinomio tiene  $N$  raíces o valores propios  $W$ . Las energías aproximadas coinciden con las raíces  $W$  y para cada valor propio tendremos un vector propio correspondiente, cuyos elementos son los coeficientes  $c_k$  con  $k = 1, 2, 3, \dots, N$  donde  $N$  es el número de funciones base considerado.

Una vez que se obtuvieron los valores propios de energía, se calcularon algunos vectores propios, tales como el del estado base y los primeros estados excitados, esto fue con el objetivo de poder construir las funciones de onda aproximadas y obtener su representación gráfica. Todo este procedimiento fue realizado mediante el programa Mathematica 9.

En las siguientes figuras se muestran las gráficas de algunas de las funciones de onda para los estados con paridad par e impar para distintos valores del parámetro  $a$ .

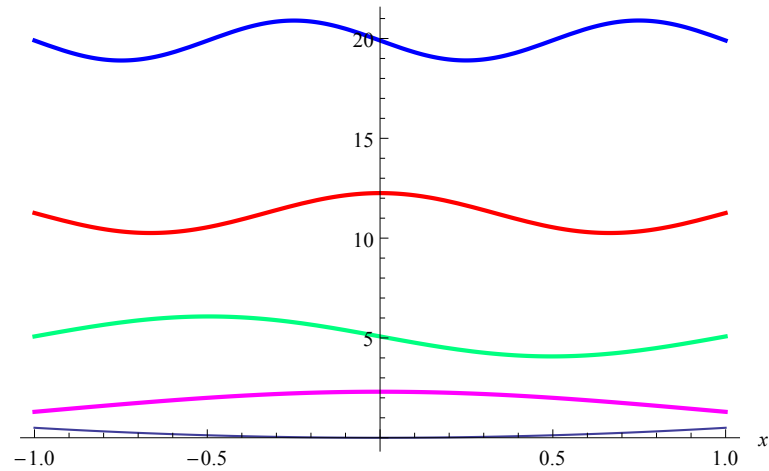
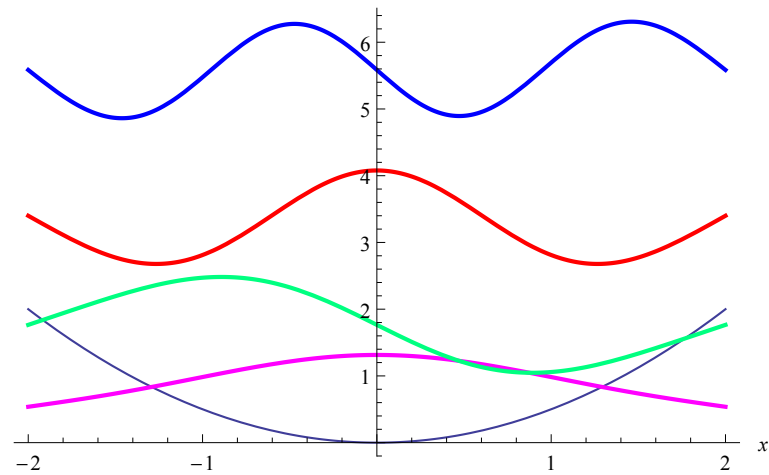
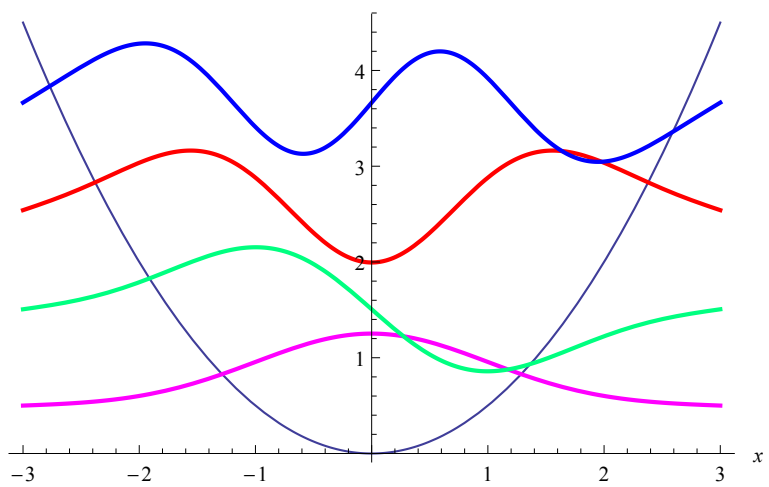
(a)  $a = 1$ (b)  $a = 2$ (c)  $a = 3$ 

Figura 5.2: Funciones de onda para el estado base y tres estados excitados OAUC para distintos valores de  $a$ .

### 5.2.3. Valor esperado de $x^2$

Habiendo construido las funciones de onda como una combinación lineal de las 35 funciones base para distintos valores del parámetro  $a$ , el cual nos proporciona el ancho de la caja, se procedió a calcular el valor esperado de  $x^2$  para algunos de los estados de nuestro sistema, estos resultados se muestran en la siguiente tabla.

Tabla 5.4: Valores esperados de  $x^2$  para distintas longitudes de la caja.

n	<b><math>a = 0.2</math></b>	<b><math>a = 0.5</math></b>	<b><math>a = 1.0</math></b>
1	0.005227487028	0.032635761223	0.128358186522
2	0.011306766843	0.070633325320	0.280449191937
3	0.012432730752	0.077711709339	0.311254373262
4	0.012826767065	0.080176719300	0.321280038150
5	0.013009138119	0.081314860301	0.325734758123
6	0.013108200570	0.081932300982	0.328101164907
7	0.013167930934	0.082304312158	0.329509281183
8	0.013206697756	0.082545644015	0.330415539223
n	<b><math>a = 1.5</math></b>	<b><math>a = 2.0</math></b>	<b><math>a = 3.0</math></b>
1	0.269080646502	0.403175743952	0.497096261944
2	0.611071200406	0.996925733444	1.461864105382
3	0.702804665534	1.243565515696	2.291512222737
4	0.728102819076	1.313675549864	2.848497304848
5	0.737448806616	1.331281785754	3.107976091909
6	0.741832534652	1.335690599743	3.178497591350
7	0.744239171351	1.336623776751	3.173793581288
8	0.745707089669	1.336581446349	3.150103700572

Realizando la comparación de los valores esperados de  $x^2$  (Tabla 5.5) obtenidos al aplicar el método variacional lineal con los valores calculados con el método exacto empleando la metodología de la referencia [18], observamos que la precisión de los valores obtenidos en el presente trabajo es comparable con los resultados exactos.

Tabla 5.5: Comparación de los valores esperados de  $x^2$  obtenidos en el presente trabajo aplicando el método variacional lineal y los valores exactos reportados en la literatura.

$a$	Método variacional lineal	Método exacto
Estado base		
0.1	0.001306907291	0.001306907291466
0.5	0.032635761223	0.032635761223458
1.0	0.128358186522	0.128358186521483
1.5	0.269080646502	0.269080646501733
2.0	0.403175743952	0.403175743951188
3.0	0.497096261944	0.497096261944391
3.5	0.499806975653	0.499806975653688
4.0	0.499992901139	0.499992901139162
4.5	0.49999851386	0.49999851385738
5.0	0.49999998199	0.49999998198863
6.0	0.49999999999	0.49999999999946
7.0	0.49999999999	0.49999999999999
8.0	0.49999999999	0.49999999999999
8.5	0.500000000000	0.500000000000000
Primer estado excitado		
0.1	0.002826725184	0.002826725183583
0.5	0.070633325320	0.070633325320400
1.0	0.280449191937	0.280449191936784
1.5	0.611071200406	0.611071200403588
2.0	0.996925733444	0.996925733436087
3.0	1.461864105382	1.461864105385759
3.5	1.496176588440	1.496176588446021
4.0	1.499804684484	1.499804684485907
4.5	1.499994628892	1.499994628891679
5.0	1.499999917649	1.499999917648717
6.0	1.499999999996	1.499999999996379
7.0	1.499999999999	1.499999999999999
8.0	1.499999999999	1.499999999999999
8.5	1.500000000000	1.500000000000000

### 5.3. Conclusiones

A lo largo de este capítulo se abordó el problema del oscilador armónico confinado en una caja de paredes impenetrables, se obtuvieron los valores propios de la energía mediante dos métodos aproximados: teoría de perturbaciones independiente del tiempo y el método variacional lineal, así como los valores exactos. De acuerdo con las tablas que reportan los resultados obtenidos, se puede ver que los valores de energía calculados mediante estos métodos difieren en distintas cifras después del punto decimal.

Aplicando el método variacional lineal y diagonalizando la matriz hamiltoniana del oscilador armónico en la base de la partícula dentro de una caja de potencial infinito de longitud  $2a$ , es posible obtener con un alto grado de precisión las energías propias del oscilador armónico confinado, ya que nuestros resultados se obtuvieron con una precisión de 25 dígitos, por lo tanto, podemos considerar hasta los primeros quince y estar seguros de que son significativos. De la comparación realizada con los resultados reportados en la literatura, observamos que nuestros resultados obtenidos tienen una mayor precisión.

La revisión realizada a la solución analítica del problema, cuya función de onda es la función hipergeométrica confluyente, y los valores propios de energía son las raíces de estas funciones; nos permitió hacer una comparación entre los valores de energía obtenidos mediante los métodos aproximados y los resultados exactos. De acuerdo con la tabla comparativa, Tabla 5.3, concluimos que el método variacional lineal nos proporciona resultados con un alto grado de precisión, puesto que es el que mejor se aproxima a los resultados exactos.





# Capítulo 6

## El oscilador armónico confinado en una caja circular

A lo largo de este capítulo se estudia el problema del OAIBC en una caja circular de paredes impenetrables. Se obtienen los valores propios de la energía mediante dos métodos de aproximación: teoría de perturbaciones independiente del tiempo a primer orden y el método variacional lineal. En este último método, se obtienen las funciones de onda aproximadas, de las cuales se realiza una representación gráfica. También, se obtienen los valores esperados de la posición para el estado base y algunos estados excitados. Los cálculos se realizan utilizando unidades naturales ( $m = w = \hbar = 1$ ).

Nos enfocamos en el hamiltoniano del OAIBC en una región circular, escrito adimensionalmente (Apéndice B), donde la energía está en unidades de  $\hbar\omega$  y la unidad de longitud es  $(\hbar/m\omega)^{1/2}$ ,

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{1}{2}\rho^2 + V(\rho), \quad (6.1)$$

donde el potencial de confinamiento  $V(\rho)$  está dado por

$$V(\rho) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 \leq \rho \leq \rho_0 \\ \infty & \text{si } \rho > \rho_0 \end{cases}. \quad (6.2)$$

Utilizando coordenadas polares, la ecuación de Schrödinger del problema queda escrita de la siguiente manera

$$\left\{ -\frac{1}{2} \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + \frac{1}{2} \rho^2 \right\} \psi(\rho, \phi) = E \psi(\rho, \phi), \quad (6.3)$$

donde la función  $\psi(\rho, \phi)$  debe satisfacer la condición de frontera de Dirichlet

$$\psi(\rho = \rho_0, \phi) = 0. \quad (6.4)$$

Observando el hamiltoniano del sistema, podemos ver que corresponde al hamiltoniano de la partícula que se mueve en una región circular con barreras de potencial infinito  $V(\rho)$ , más el término de energía potencial  $\frac{1}{2}\rho^2$ . Por lo tanto, en ambos métodos de aproximación consideramos como punto de partida el problema de la partícula libre que se mueve en el interior de una caja circular de radio  $\rho_0$  y paredes impenetrables, el cual ya se resolvió en la Sección 4.2.

## 6.1. Teoría de perturbaciones independiente del tiempo

De acuerdo con lo ya abordado en la Sección 5.1 ecuación (5.1), en este caso en el hamiltoniano del sistema dado por la ecuación (6.1), identificamos a  $H'$  como  $H' = \frac{1}{2}\rho^2$  mientras que a  $H_0$ , como  $H_0 = \frac{p^2}{2} + V(\rho)$ , el cual corresponde al sistema ya conocido, cuya energía asociada es  $E_{nm}^0$ , correspondiente al hamiltoniano de la partícula que se mueve en el interior de una región circular de paredes impenetrables, cuya energía y función de onda son

$$E_{nm}^0 = \frac{\hbar^2 X_{n|m|}^2}{2\rho_0^2}, \quad (6.5)$$

$$\psi_{nm}^0(\rho, \phi) = \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}\left(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}. \quad (6.6)$$

Considerando la aproximación a primer orden tenemos que los eigenvalores de la energía están dados por

$$E_n = E_n^0 + E_n^1. \quad (6.7)$$

Para el número cuántico de momento angular  $m \neq 0$ , los niveles de energía están doblemente degenerados, por lo tanto, para el cálculo de  $E_n^1$  necesitamos utilizar la teoría de perturbaciones independiente del tiempo para estados degenerados.

Un estado es doblemente degenerado cuando dos estados distintos  $\psi_a^0$  y  $\psi_b^0$  les corresponde la misma energía [23]. Siguiendo la notación de la referencia [23] tenemos,

$$H_0\psi_a^0 = E^0\psi_a^0, \quad H_0\psi_b^0 = E^0\psi_b^0, \quad \langle \psi_a^0 | \psi_b^0 \rangle = 0, \quad (6.8)$$

con  $\psi_a^0$  y  $\psi_b^0$  normalizadas.

La expresión para la corrección a primer orden de la energía es

$$E_{\pm}^1 = \frac{1}{2} \left[ W_{aa} + W_{bb} \pm \sqrt{(W_{aa} - W_{bb})^2 + 4|W_{ab}|^2} \right] \quad (6.9)$$

donde el término  $W_{ij}$  está dado por

$$W_{ij} = \langle \psi_i^0 | H' | \psi_j^0 \rangle, \quad (i, j = a, b). \quad (6.10)$$

Entonces, para calcular los valores de energía para el caso doblemente degenerado, primero necesitamos calcular los términos  $W_{ij}$  dada por la ecuación anterior, para ello, consideramos las siguientes funciones de onda,

$$\psi_a^0(\rho, \phi) = \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \quad (6.11)$$

y

$$\psi_b^0(\rho, \phi) = (-1)^m \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-im\phi}, \quad (6.12)$$

como  $m$  es un número entero, aplicamos la relación [28]

$$J_{-n}(z) = (-1)^n J_n(z). \quad (6.13)$$

Comenzando con el término  $W_{ab}$

$$\begin{aligned}
W_{ab} &= \langle \psi_a^0 | H' | \psi_b^0 \rangle \\
&= \left\langle \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \left| \frac{1}{2} \rho^2 \right| \frac{(-1)^m \sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-im\phi} \right\rangle \\
&= \left\langle \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}) \left| \frac{1}{2} \rho^2 \right| \frac{(-1)^m \sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}) \right\rangle \int_0^{2\pi} \frac{1}{2\pi} e^{-2im\phi} d\phi,
\end{aligned}$$

calculando la integral de la parte angular

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi} \frac{1}{2\pi} e^{-2im\phi} d\phi &= \frac{1}{2\pi} \left\{ \int_0^{2\pi} \cos(2m\phi) d\phi - i \int_0^{2\pi} \sen(2m\phi) d\phi \right\} \\
&= \frac{1}{2\pi} \left\{ \frac{1}{2m} \sen(2m\phi) + \frac{i}{2m} \cos(2m\phi) \right\} \Big|_0^{2\pi} \\
&= 0,
\end{aligned}$$

por lo tanto,

$$W_{ab} = 0. \quad (6.14)$$

Ahora continuando con  $W_{aa}$

$$\begin{aligned}
W_{aa} &= \langle \psi_a^0 | H' | \psi_a^0 \rangle \\
&= \left\langle \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \left| \frac{1}{2} \rho^2 \right| \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \right\rangle \\
&= \left\langle \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}) \left| \frac{1}{2} \rho^2 \right| \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}) \right\rangle \int_0^{2\pi} \frac{1}{2\pi} d\phi,
\end{aligned}$$

$$W_{aa} = \left\langle \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}) \left| \frac{1}{2} \rho^2 \right| \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}) \right\rangle. \quad (6.15)$$

De manera análoga calculamos la expresión para  $W_{bb}$

$$\begin{aligned}
W_{bb} &= \langle \psi_b^0 | H' | \psi_b^0 \rangle \\
&= \left\langle \frac{(-1)^m \sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-im\phi} \left| \frac{1}{2} \rho^2 \right| \frac{(-1)^m \sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-im\phi} \right\rangle \\
&= (-1)^{2m} \left\langle \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}) \left| \frac{1}{2} \rho^2 \right| \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}) \right\rangle \int_0^{2\pi} \frac{1}{2\pi} d\phi,
\end{aligned}$$

pero  $(-1)^{2m} = 1$  para  $m = 0, 1, 2, \dots$ , entonces

$$W_{bb} = \left\langle \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}) \left| \frac{1}{2} \rho^2 \right| \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}) \right\rangle. \quad (6.16)$$

Notamos que  $W_{bb} = W_{aa}$ , con lo cual, nuestra expresión para la corrección a primer orden de la energía se reduce al caso de teoría de perturbaciones para estados no degenerados (ver Apéndice C),

$$E_{\pm}^1 = W_{aa} = W_{bb} = \frac{\rho_0^2}{3} \left\{ \frac{m^2 - 1}{X_{nm}^2} + \frac{1}{2} \right\}. \quad (6.17)$$

Por lo tanto, los eigenvalores de energía del OAIBC en una región circular calculados mediante teoría de perturbaciones a primer orden, ecuación (6.7), está dado por la siguiente expresión,

$$E_{nm} = \frac{X_{n|m|}^2}{2\rho_0^2} + \frac{\rho_0^2}{3} \left\{ \frac{m^2 - 1}{X_{n|m|}^2} + \frac{1}{2} \right\} \quad (6.18)$$

Para obtener los ceros de las funciones de Bessel y evaluar la expresión inmediata anterior en diferentes valores de  $n$  y  $m$  utilizamos el programa Mathematica 9, es así como obtuvimos los valores numéricos de las energías. A continuación se presenta la tabla donde se reportan los resultados obtenidos para distintos valores del momento angular  $m$  y diferentes radios de confinamiento  $\rho_0$ .

Tabla 6.1: Energías para el estado base y algunos estados excitados del OAIBC como función del radio de confinamiento, calculadas con teoría de perturbaciones a primer orden. Las energías se encuentran en unidades de  $\hbar\omega$  y la distancia en unidades de  $(\hbar/m\omega)^{1/2}$ .

n	$m = 0$	$m = 1$	$m = 2$	$m = 0$	$m = 1$	$m = 2$
	$\rho_0 = 0.5$			$\rho_0 = 1$		
0	11.59363	29.40561	52.80038	3.00062	7.50765	13.39189
1	60.98146	98.47858	141.74519	15.39136	24.77589	35.60578
2	149.81457	207.04057	270.08494	37.60572	51.91639	67.68443
3	278.12165	355.08320	437.88319	69.68441	88.92705	109.63133
4	445.90590	542.60498	645.15267	111.63132	135.80749	161.44733
5	653.16812	769.60548	891.89736	163.44732	192.55762	223.13269
	$\rho_0 = 1.5$			$\rho_0 = 2$		
0	1.53047	3.63766	6.32134	1.15901	2.50191	4.11515
1	7.12178	11.31243	16.15120	4.43182	6.81897	9.57937
2	17.00654	23.37488	30.39627	10.00974	13.60410	17.57388
3	31.26745	39.82406	49.03421	18.03711	22.85676	28.04996
4	49.91215	60.65981	72.06089	28.52722	34.57687	40.99846
5	72.94234	85.88209	99.47506	41.48300	48.76440	56.41658
	$\rho_0 = 5$			$\rho_0 = 10$		
0	2.84137	4.46031	5.64204	10.93175	16.74008	20.59006
1	4.50261	5.15104	5.93652	15.72510	16.91276	18.43235
2	5.55313	6.23666	7.05224	16.59599	17.18416	18.08240
3	6.88754	7.71708	8.65927	17.12213	17.55427	18.21806
4	8.58793	9.59230	10.69528	17.63181	18.02307	18.58947
5	10.67242	11.86230	13.14128	18.19741	18.59058	19.12056

## 6.2. Método variacional lineal

Una vez conocida las funciones de onda para una partícula libre que se mueve dentro de una región circular, podemos utilizarlas como funciones base en la construcción de nuestra función de prueba, ecuación (3.3), y aplicar el método variacional lineal al problema del OAIBC en una región circular, cuyo hamiltoniano está dado por la ecuación (6.1).

Dado el hamiltoniano de nuestro sistema, con funciones y valores propios desconocidos, proponemos la función de onda aproximada como una combinación lineal de las funciones base, en este caso, son las funciones de onda para la partícula libre restringida a moverse en una región circular dadas por la ecuación (4.28). Entonces

$$\psi_{nm}(\rho, \phi) = \sum_{n=1}^N c_n \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}. \quad (6.19)$$

De acuerdo con este método, resolver la ecuación de Schrödinger es equivalente a resolver la ecuación

$$(\mathbf{H} - E\mathbf{I})\vec{c} = 0, \quad (6.20)$$

donde  $\mathbf{H}$  es la matriz hamiltoniana,  $\mathbf{I}$  es la matriz identidad y  $\vec{c}$  es el vector de coeficientes  $c_n$  de la ecuación (6.19).

La expresión para los elementos de  $\mathbf{H}$  está dada por,

$$H_{ij} = E_{im}^0 \delta_{ij} + \frac{1}{2} \langle \psi_{im}^0(\rho, \phi) | \rho^2 | \psi_{jm}^0(\rho, \phi) \rangle; \quad (6.21)$$

después de realizar el cambio de variable  $u = \frac{\rho}{\rho_0}$ , el segundo término del lado derecho de la ecuación previa, resulta ser

$$\frac{1}{2} \langle \psi_{im}^0(\rho, \phi) | \rho^2 | \psi_{jm}^0(\rho, \phi) \rangle = \frac{\rho_0^2}{J_{|m|+1}(X_{i|m|}) J_{|m|+1}(X_{j|m|})} \int_0^1 J_{|m|}(X_{i|m|} u) u^3 J_{|m|}(X_{j|m|} u) du. \quad (6.22)$$

Los procesos, el que involucra toda una serie de integrales de las funciones de Bessel y el de la diagonalización de la matriz  $\mathbf{H}$  para obtener los eigenvalores de energía y los vectores propios, se realizaron con el software Mathematica 9. Se construyó un programa (ver Apéndice D) en el cual se varía el número cuántico de momento angular,



el radio de confinamiento y el número de funciones base, permitiéndonos obtener los resultados de interés físico.

### 6.2.1. Eigenvalores de energía

Los valores propios de energía se calcularon para diferentes valores de los números cuánticos principal  $n$  y de momento angular  $m$  del OAIBC en una región circular de radio  $\rho_0$  y paredes impenetrables. Para decidir el tamaño de la matriz hamiltoniana a diagonalizar, se fue incrementando el número de funciones base comenzando con 10 funciones y se observó cómo cambian los valores en la energía. Al llegar a considerar un conjunto de 40 funciones base, los valores de la energía comenzaron a mantenerse casi constantes variando únicamente en sus últimas cifras a pesar del incremento en el número de funciones consideradas. Los resultados que se reportan a continuación fueron obtenidos considerando una matriz hamiltoniana de  $40 \times 40$ . Los valores de energía se obtuvieron para distintos radios de confinamiento  $\rho_0$ . Estos resultados cuentan con un alto grado de precisión ya que al programa realizado en Mathematica le indicamos trabajar con una representación decimal de 50 cifras [32], por lo tanto, en la Tabla 6.2 estamos reportando únicamente hasta quince cifras después del punto decimal y estamos seguros de que son significativas.

Tabla 6.2: Valores propios de energía para el OAIBC mediante el método variacional lineal, considerando 40 funciones como base.

n	$m = 0$	$m = 1$	$m = 2$
<b><math>\rho_0 = 0.5</math></b>			
0	11.593619250686066	29.405600446696809	52.800372831635926
1	60.981459384121251	98.478581116910973	141.745193936538897
2	149.814569274644157	207.040575745362332	270.084936817379912
3	278.121637272359635	355.083201140042661	437.883187555222776
4	445.905900816610313	542.604975795769292	645.152674775781861
5	653.168117852805722	769.605477295142464	891.897356720364314
<b><math>\rho_0 = 1.0</math></b>			
0	2.99999999999724	7.507172180451906	13.391538049464508
1	15.391538049465129	24.776009996133567	35.605834867302256
2	37.605834867303450	51.916476053268035	67.684481854393496
3	69.684481854393113	88.927104210455298	109.631369354056133
4	111.631369354056758	135.807531144568401	161.447354677389882
5	163.447354677391331	192.557646297868786	223.132713847436207
<b><math>\rho_0 = 1.5</math></b>			
0	1.523532260259100	3.632219188402444	6.317322384466056
1	7.123686643409848	11.313721964856422	16.151821050963687
2	17.007854942295086	23.375816582585653	30.396887758146967
3	31.268248102737036	39.824676322134920	49.034667626428430
4	49.912673083743798	60.660237732169854	72.061228009967110
5	72.942705218143772	85.882398690764461	99.475315300767036
<b><math>\rho_0 = 2.0</math></b>			
0	1.122208529679391	2.471775211351799	4.092599353352135
1	4.440505209959445	6.825774449364276	9.582826315054520
2	10.016982187607310	13.609346921323533	17.577387572897130
3	18.041610021220144	22.860234666193996	28.052550026967925
4	28.530180344341943	34.579270100098633	41.000359977039906
5	41.485073465925502	48.766142314429139	56.418019738044578
<b><math>\rho_0 = 5.0</math></b>			
0	1.00000000665334	2.00000015903947	3.00000189625743
1	3.00000348022163	4.00003780601312	5.000027155496552
2	5.000037191045016	6.000240164078652	7.001142270441120
3	7.001381139226244	8.005788245521869	9.018822756654966
4	9.021153881884922	10.059679437665036	11.136854483773863
5	11.146675838328571	12.296972983768816	13.520205763457545
<b><math>\rho_0 = 10.0</math></b>			
0	1.00000000000126	2.00000000000536	2.99999999999685
1	3.00000000000012	4.00000000000091	4.99999999999600
2	4.99999999999850	5.99999999999882	6.99999999999710
3	7.00000000000018	8.000000000000297	9.00000000000055
4	9.000000000000128	10.000000000000377	10.99999999999888
5	11.000000000000194	12.000000000000210	12.99999999999666

Una vez que se calcularon los valores propios de energía para ciertos valores de los números cuánticos  $n$  y  $m$ , se realizaron algunas gráficas las cuales nos permiten tener una visualización del comportamiento de la energía como función del radio de confinamiento  $\rho_0$ . Como podemos observar, la energía aumenta rápidamente conforme disminuimos el radio de confinamiento.

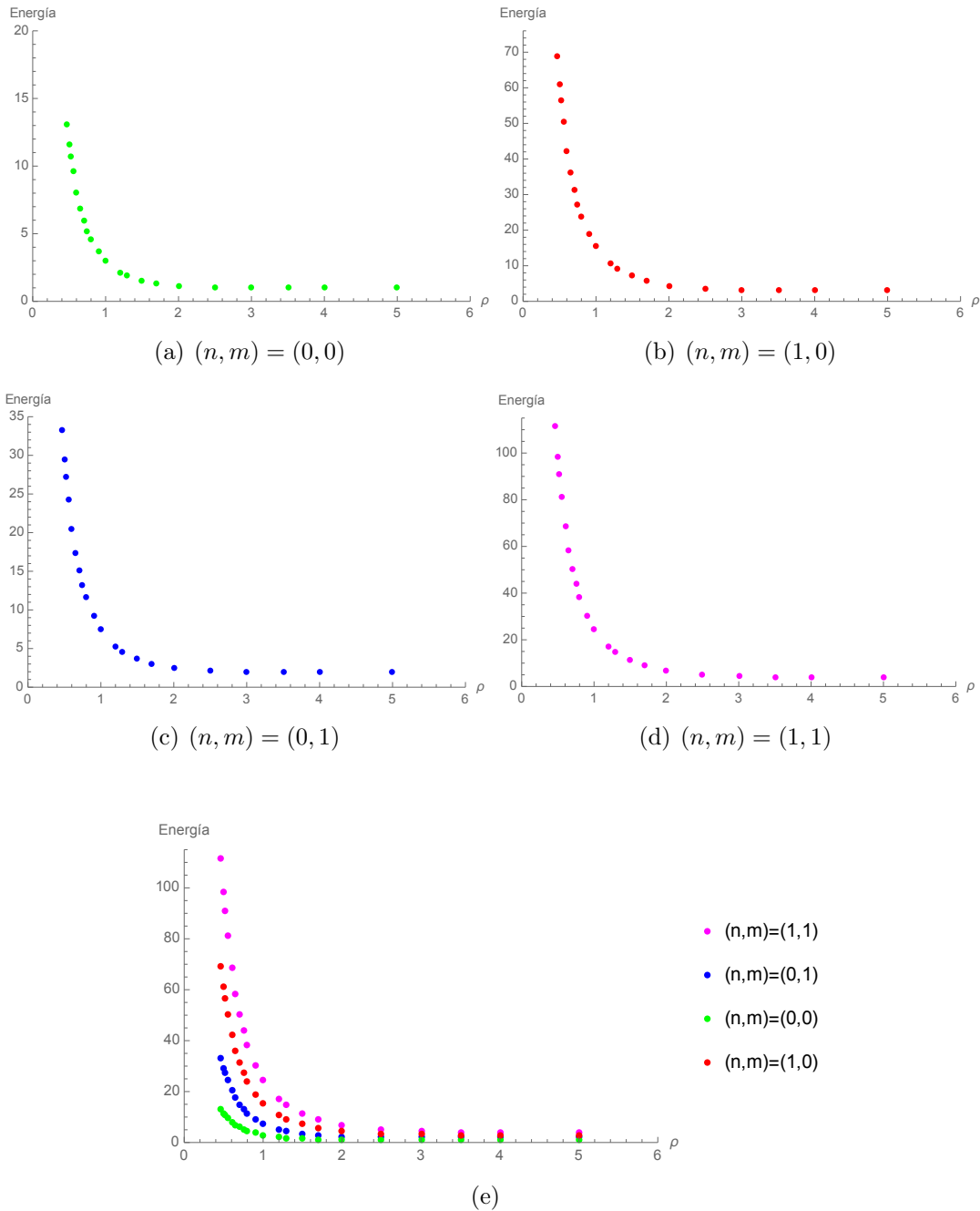


Figura 6.1: Gráfica de la energía como función del radio de confinamiento.

En la siguiente figura, mostramos una gráfica de los niveles de energía para tres diferentes valores del número cuántico de momento angular  $m$ , y cuatro valores distintos del número cuántico principal  $n$  y un radio de confinamiento fijo  $\rho_0 = 1$ .

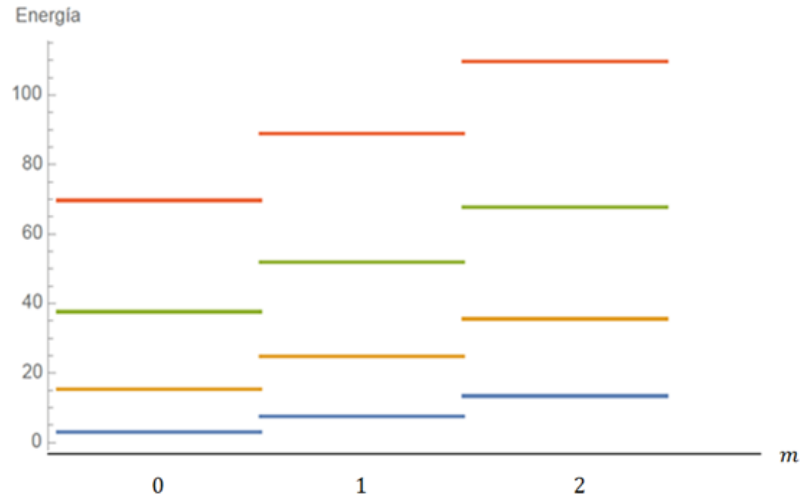


Figura 6.2: Niveles de energía

Posteriormente, realizamos una comparación de los valores obtenidos para las energías mediante los métodos de aproximación y los obtenidos de forma exacta reportados en [18]. En esta comparación, podemos observar que los resultados obtenidos mediante el método variacional lineal son bastante precisos ya que nos da una buena aproximación a los valores exactos.

Tabla 6.3: Comparación entre los valores propios de energía del OAIBC.

	Método exacto [18]	Método Variacional Lineal	Teoría de Perturbaciones
$\rho_0$	<b><math>n = 0 \quad m = 0</math></b>		
0.5	11.593 619 250 686	11.593 619 250 686 066	11.593 63
1.0	3.000 000 000 000	2.999 999 999 999 724	3.000 62
2.0	1.122 208 529 678	1.122 208 529 679 391	1.159 01
$\rho_0$	<b><math>n = 0 \quad m = 1</math></b>		
0.5	29.405 600 446 697	29.405 600 446 696 809 0	29.405 61
1.0	7.507 172 180 452	7.507 172 180 451 906	7.507 65
2.0	2.471 775 211 350	2.471 775 211 351 799	2.501 91
$\rho_0$	<b><math>n = 1 \quad m = 0</math></b>		
0.5	60.981 459 384 120	60.981 459 384 121 251	60.981 46
1.0	15.391 538 049 465	15.391 538 049 465 129	15.391 36
2.0	4.440 505 209 954	4.440 505 209 959 445	4.431 82

### 6.2.2. Funciones propias

La construcción de las funciones de onda para el OAIBC en una región circular se realizó como una combinación lineal de las funciones base, el tamaño de esta base es  $N = 40$ .

$$\psi_{nm}(\rho, \phi) = \sum_{n=1}^N c_n \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}\left(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}. \quad (6.23)$$

donde  $c_n$  son las entradas de los vectores propios correspondientes a los eigenvalores de energía, los cuales se calcularon con la ayuda de Mathematica.

Posteriormente se graficó la parte real de las funciones de onda de algunos estados, así como también  $|\psi_{nm}(\rho, \phi)|^2$  que representa la densidad de probabilidad. Al momento de obtener las gráficas de  $|\psi_{nm}(\rho, \phi)|^2$  pudimos observar que no se aprecia el comportamiento de la parte angular de las funciones de onda, esto es debido a que al realizar el producto de  $\psi_{nm}^* \psi_{nm}$  se anula la dependencia angular. Como el sistema presenta degeneración para el número cuántico de momento angular  $m \neq 0$ , entonces, para tener una visualización gráfica de los nodos angulares, lo que hacemos es construir una nueva función de onda, que puede ser expresada como la suma de los estados degenerados o bien la resta de estos estados.

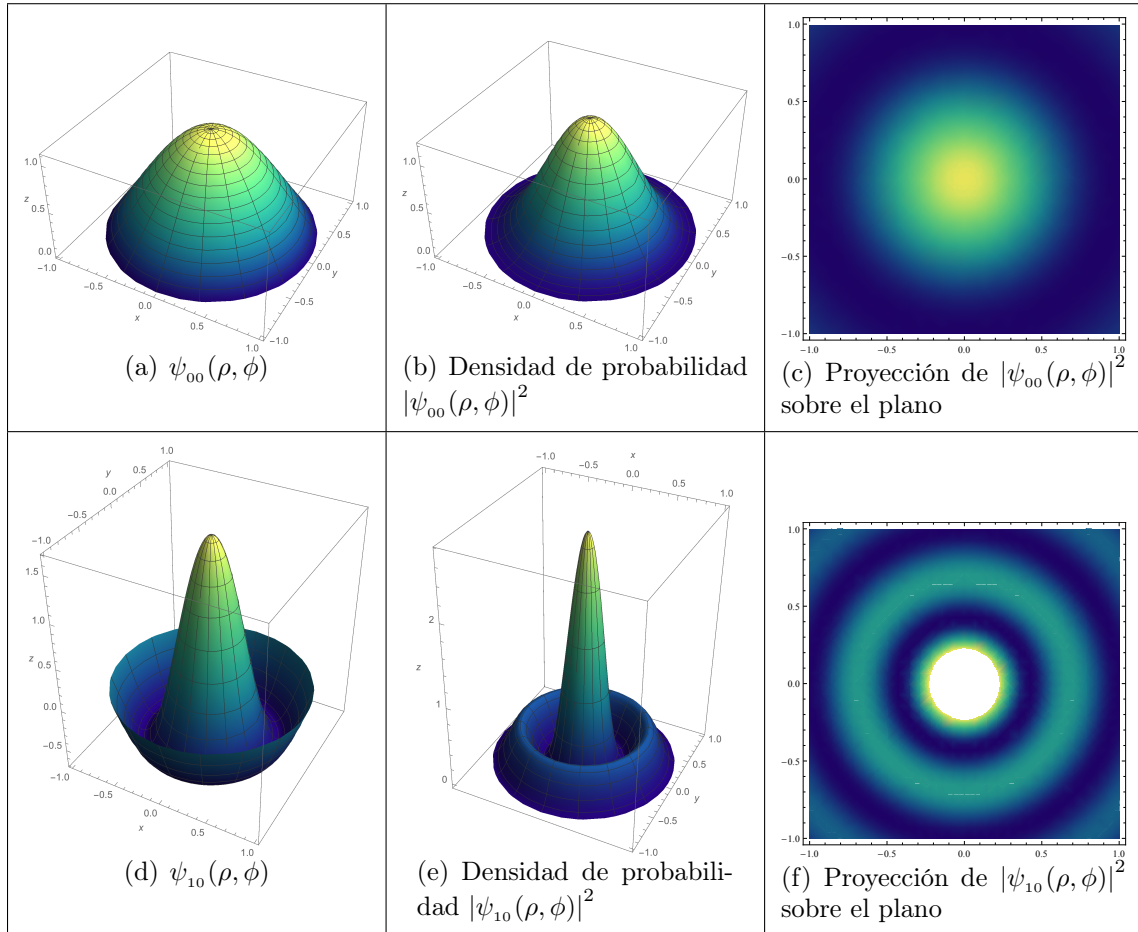
$$\psi_{nm}^{\pm}(\rho, \phi) = \sum_{n=1}^N c_n \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}\left(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (e^{im\phi} \pm e^{-im\phi}).$$

Al considerar únicamente la suma de los estados degenerados y normalizar nuevamente la parte angular, la función de onda queda reescrita como sigue,

$$\psi_{nm}^{+}(\rho, \phi) = \sum_{n=1}^N c_n \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}\left(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}\right) \frac{1}{\sqrt{2}} \cos(m\phi), \quad (6.24)$$

esta función de onda es la que se utilizó para obtener las gráficas para cuando  $m \neq 0$ .

A continuación, mostramos las siguientes gráficas: en el lado izquierdo de la Figura 6.3 tenemos las gráficas de  $\psi_{nm}(\rho, \phi)$ , en el centro las gráficas de la densidad de probabilidad  $|\psi_{nm}(\rho, \phi)|^2$ , y del lado derecho las gráficas correspondientes a la proyección de la densidad de probabilidad sobre el plano  $xy$ .



Continúa en la siguiente página

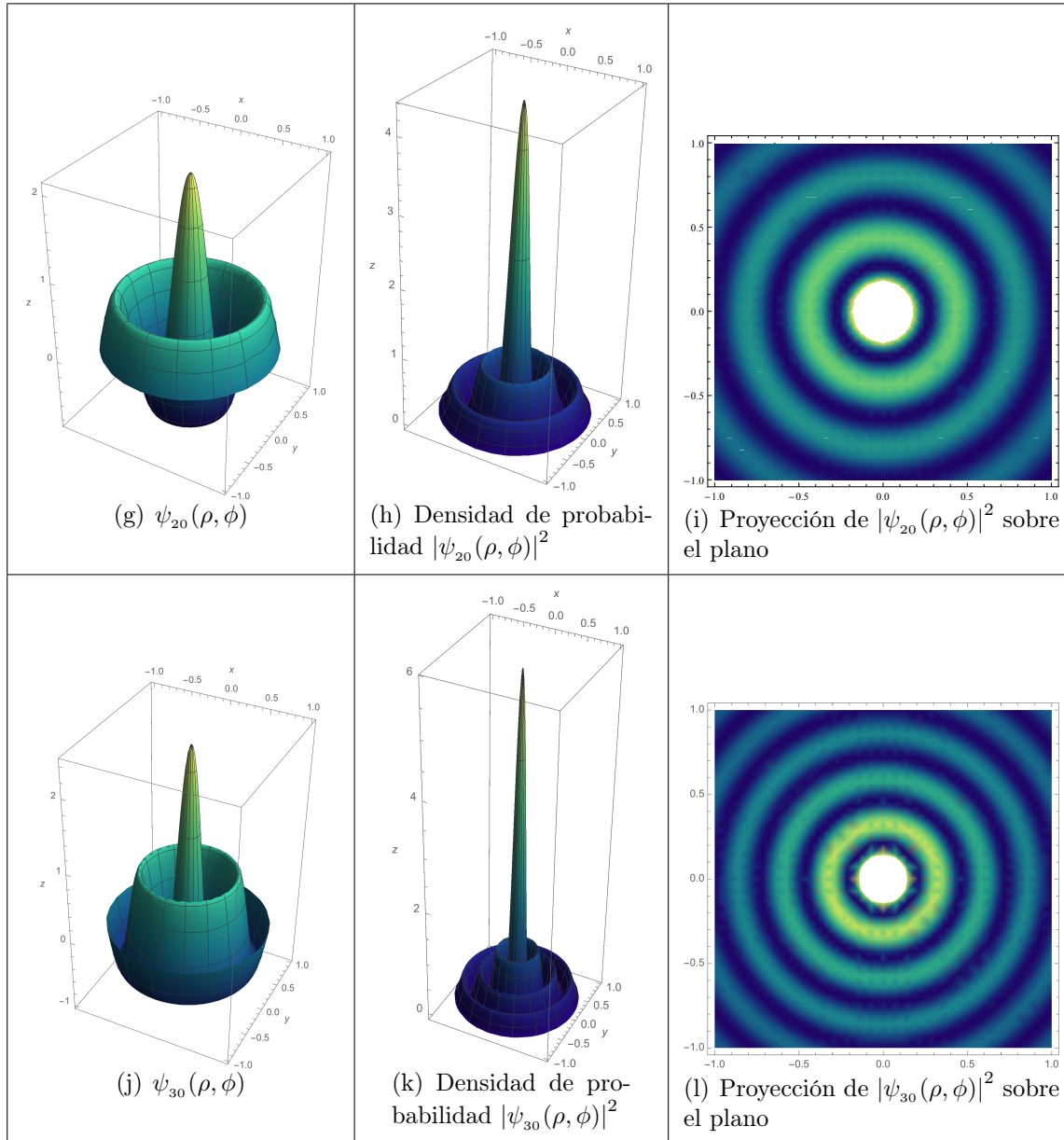
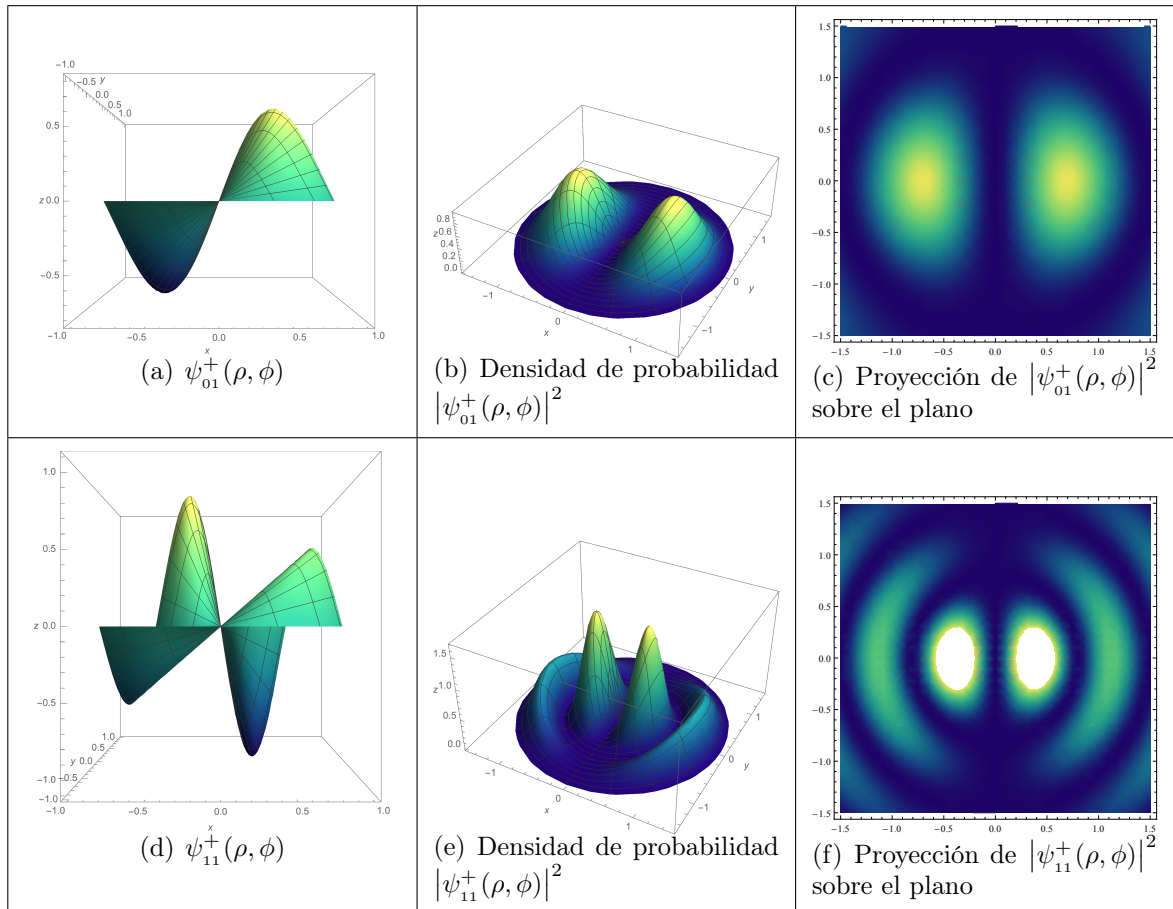


Figura 6.3: Gráficas de  $\psi_{nm}(\rho, \phi)$ ,  $|\psi_{nm}(\rho, \phi)|^2$  y proyección de la densidad de probabilidad  $|\psi_{nm}(\rho, \phi)|^2$  sobre el plano  $xy$ ; correspondientes al estado base y tres estados excitados radialmente del OAIBC.

En la siguiente figura, los incisos (a) y (d) corresponden a las gráficas de  $\psi_{nm}^+(\rho, \phi)$ , (b) y (e) muestran las gráficas de  $|\psi_{nm}^+(\rho, \phi)|^2$  mientras que las gráficas mostradas en (c) y (f) corresponden a la proyección de la densidad de probabilidad  $|\psi_{nm}^+(\rho, \phi)|^2$  sobre el plano  $xy$ .



Continúa en la siguiente página



Los incisos (g) y (j) corresponden a las gráficas de  $\psi_{nm}^+(\rho, \phi)$ , (h) y (k) muestran las gráficas de  $|\psi_{nm}^+(\rho, \phi)|^2$  mientras que las gráficas mostradas en (i) y (l) corresponden a la proyección de la densidad de probabilidad  $|\psi_{nm}^+(\rho, \phi)|^2$  sobre el plano  $xy$ .

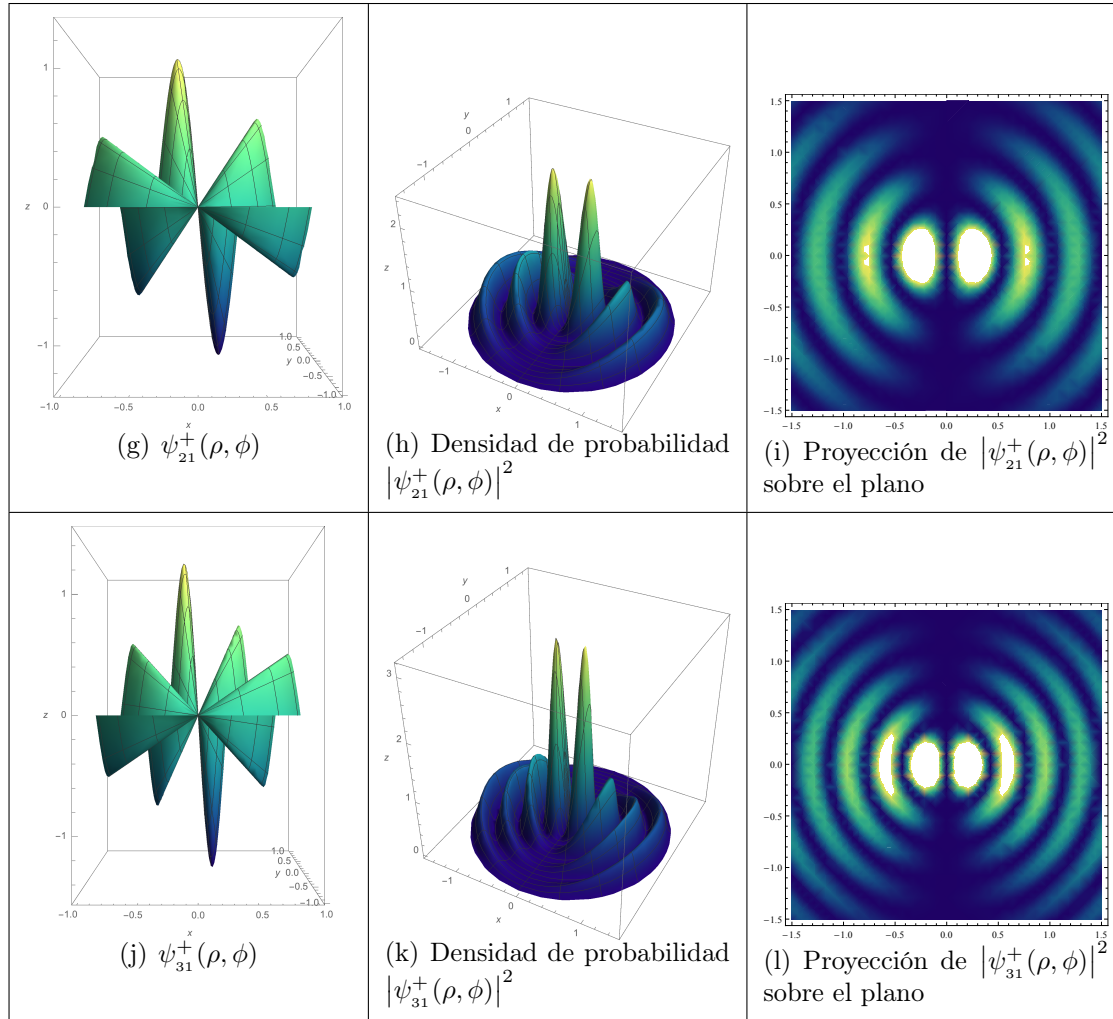
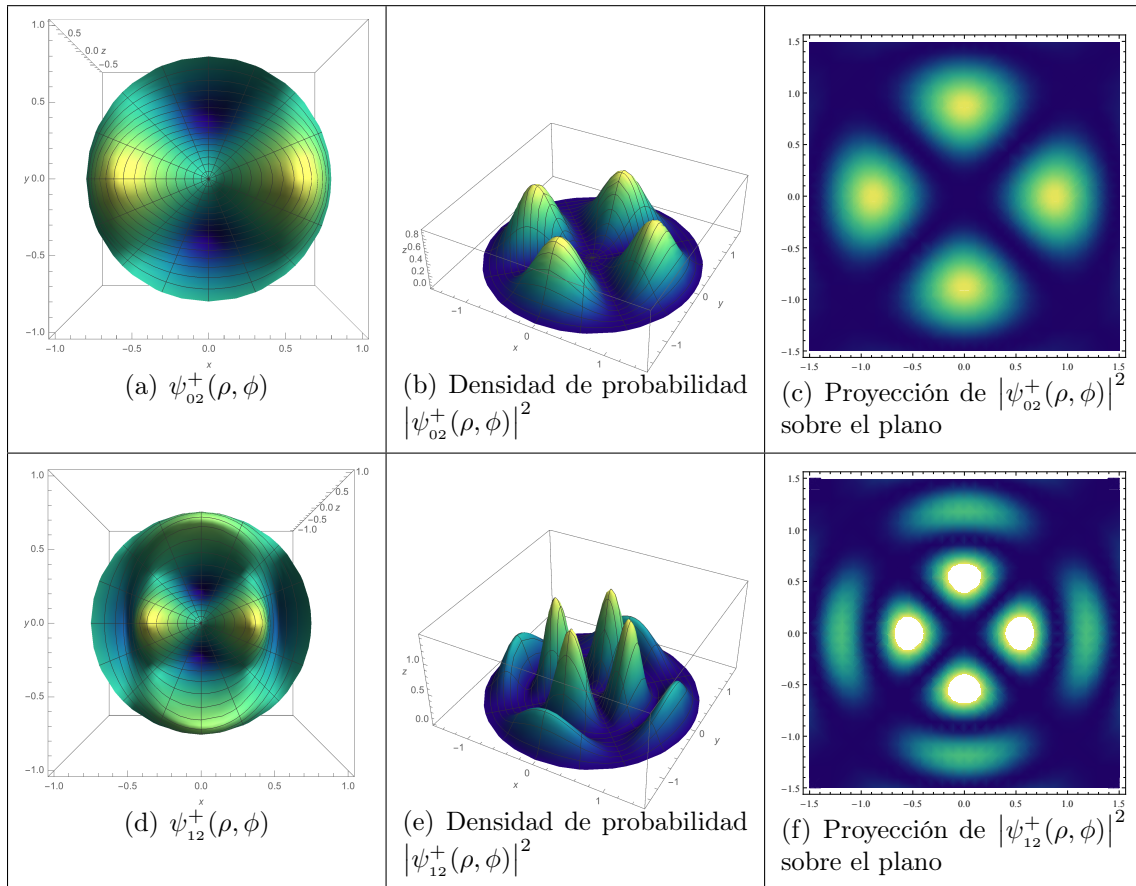


Figura 6.4: Gráficas de  $\psi_{nm}^+(\rho, \phi)$ ,  $|\psi_{nm}^+(\rho, \phi)|^2$  y proyección de la densidad de probabilidad  $|\psi_{nm}^+(\rho, \phi)|^2$  sobre el plano  $xy$ ; correspondientes al OAIBC en una región circular.

En la figura que se muestra a continuación, los incisos (a) y (d) corresponden a las gráficas de  $\psi_{nm}^+(\rho, \phi)$ , (b) y (e) muestran las gráficas de  $|\psi_{nm}^+(\rho, \phi)|^2$  mientras que las gráficas mostradas en (c) y (f) corresponden a la proyección de la densidad de probabilidad  $|\psi_{nm}^+(\rho, \phi)|^2$  sobre el plano  $xy$ .



Continúa en la siguiente página

Los incisos (g) y (j) corresponden a las gráficas de  $\psi_{nm}^+(\rho, \phi)$ , (h) y (k) muestran las gráficas de  $|\psi_{nm}^+(\rho, \phi)|^2$  mientras que las gráficas que se muestran en (i) y (l) son la proyección de la densidad de probabilidad  $|\psi_{nm}^+(\rho, \phi)|^2$  sobre el plano  $xy$ .

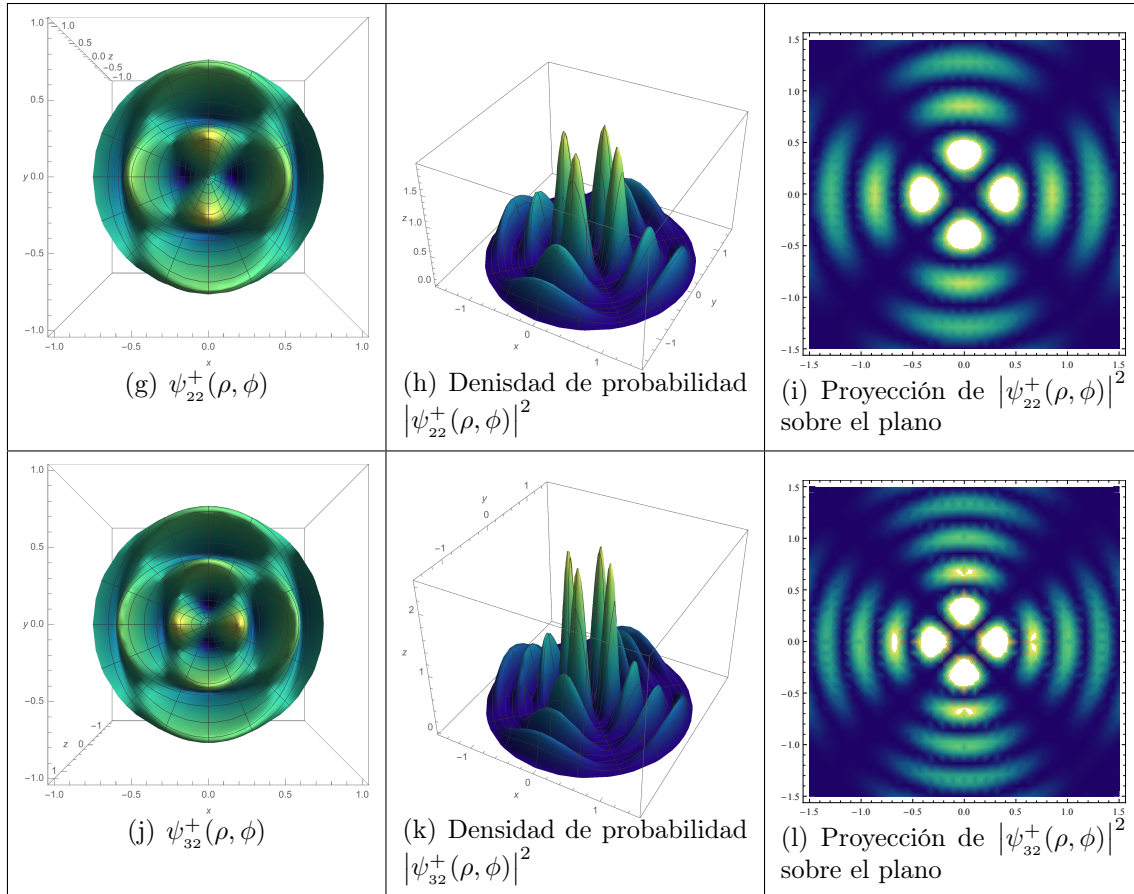


Figura 6.5: Gráficas de  $\psi_{nm}^+(\rho, \phi)$ ,  $|\psi_{nm}^+(\rho, \phi)|^2$  y proyección de la densidad de probabilidad  $|\psi_{nm}^+(\rho, \phi)|^2$  sobre el plano  $xy$ ; correspondientes al OAIBC en una región circular.

### 6.2.3. Valor esperado de la posición $\langle \rho \rangle$

Para el cálculo de los valores esperados de la posición  $\langle \rho \rangle$ , se consideraron las funciones de onda aproximadas mediante el método variacional lineal obtenidas en la sección anterior. La realización de las integrales se efectuó con el software Mathematica 9, con una precisión de veinte cifras. En la siguiente tabla reportamos los resultados con únicamente hasta doce cifras decimales.

Tabla 6.4: Valores esperados de la posición  $\langle \rho \rangle$ , obtenidos con la función de onda construida mediante el método variacional lineal.

n	$m = 0$	$m = 1$	$m = 2$
<b><math>\rho_0 = 0.2</math></b>			
0	0.084810648799	0.110492002453	0.124493743562
1	0.096425119137	0.104001225564	0.111474477488
2	0.098394125706	0.102165156984	0.106865432980
3	0.099079188364	0.101374573085	0.104632471006
<b><math>\rho_0 = 0.5</math></b>			
0	0.211943258788	0.276176663404	0.311198992049
1	0.241092749713	0.260015501819	0.278690188875
2	0.246000409282	0.255421970404	0.267168690528
3	0.247706584078	0.253442454772	0.261585206542
<b><math>\rho_0 = 1.0</math></b>			
0	0.421335065398	0.550712050101	0.621308144053
1	0.483093239610	0.520412735980	0.557503951302
2	0.492464801218	0.511123451106	0.534494856418
3	0.495678314874	0.507070370632	0.523294543944
<b><math>\rho_0 = 2</math></b>			
0	0.769025634349	1.049806643480	1.207381149996
1	0.987667328590	1.052079784728	1.119134033766
2	0.999325728551	1.031177684533	1.074125306314
3	0.999818233794	1.020100746419	1.050603499794
<b><math>\rho_0 = 5</math></b>			
0	0.886226921650	1.329340312771	1.661674706848
1	1.550895626162	1.827828843877	2.077004639121
2	2.007731935988	2.221776252509	2.424635372627
3	2.374635316017	2.545602647644	2.699789212392
<b><math>\rho_0 = 10</math></b>			
0	0.886226925453	1.329340388180	1.661675485231
1	1.550897119556	1.827843033833	2.077094356814
2	2.007857877979	2.222490961490	2.427604029194
3	2.378273038228	2.558720610450	2.735922722742

Para ver que tan precisos son los valores esperados de la posición calculados con el método variacional lineal, se realizó el cálculo de estos valores utilizando la me-

todoología empleada en la referencia [18] con la solución exacta, la cual consiste en encontrar las raíces de la función hipergeométrica y así tener la expresiones de las funciones de onda de los diferentes estados y posteriormente calcular las integrales correspondientes. Haciendo la comparación (Tabla 6.5), observamos que los resultados proporcionados aplicando el método variacional lineal son comparables en precisión con los resultados exactos.

Tabla 6.5: Comparación de los valores esperados de la posición  $\langle \rho \rangle$ , obtenidos con el método variacional lineal y con la solución exacta.

	Método variacional lineal	Método exacto
n	<b><math>m = 0</math></b>	
	<b><math>\rho_0 = 0.5</math></b>	
0	0.211943258788	0.211943258790727
1	0.241092749713	0.241092749713545
2	0.246000409282	0.246000409281674
	<b><math>\rho_0 = 1.0</math></b>	
0	0.421335065398	0.421335065495102
1	0.483093239610	0.483093239630371
2	0.492464801218	0.492464801208358
	<b><math>\rho_0 = 2.0</math></b>	
0	0.769025634349	0.76902563650167
1	0.987667328590	0.98766732917941
2	0.999325728551	0.99932572970211
	<b><math>\rho_0 = 10.0</math></b>	
0	0.886226925453	0.88622692545338
1	1.550897119556	1.55089711955065
2	2.007857877979	2.00785787810698
n	<b><math>m = 1</math></b>	
	<b><math>\rho_0 = 0.5</math></b>	
0	0.276176663404	0.276176663407358
1	0.260015501819	0.260015501820034
2	0.255421970404	0.255421970404349
	<b><math>\rho_0 = 1.0</math></b>	
0	0.550712050101	0.55071205021416
1	0.520412735980	0.52041273600836
2	0.511123451106	0.51112345111344
	<b><math>\rho_0 = 2.0</math></b>	
0	1.049806643480	1.04980664411235
1	1.052079784728	1.05207978556775
2	1.031177684533	1.03117768413617
	<b><math>\rho_0 = 10.0</math></b>	
0	1.329340388180	1.32934038817976
1	1.827843033833	1.82784303379114
2	2.222490961490	2.22249096149087

## 6.3. Conclusiones

Al realizar los cálculos mediante teoría de perturbaciones independientes del tiempo para estados degenerados, pudimos observar que el procedimiento se redujo al caso de teoría de perturbaciones para estados no degenerados, esto es debido a que el número cuántico de momento angular toma valores enteros e hicimos uso de una de las propiedades importantes de las funciones de Bessel.

Por otra parte, al aplicar el método variacional lineal a nuestro sistema, de acuerdo con los resultados obtenidos para las energías propias del estado base y los primeros estados excitados, basta con considerar 40 funciones como base para garantizar la convergencia de dichos valores.

Al observar los valores propios de energía obtenidos mediante el método variacional lineal, podemos darnos cuenta que conforme aumentamos el radio de confinamiento, la energía en los distintos estados tiende a los valores del caso libre, tal como es de esperarse. De la gráfica de la energía como función del radio de confinamiento, podemos concluir que la energía en los diferentes estados incrementa muy rápidamente a medida que disminuimos el radio de la caja circular.

Los resultados obtenidos mediante el método variacional lineal, tales como energías propias del sistema y los valores esperados de la posición calculados para distintos tamaños de la caja circular, se obtuvieron con un alto grado de precisión, lo cual es muy útil ya que puede usarse como valores de referencia en la precisión de otros métodos.

Al realizar la comparación entre los dos métodos de aproximación utilizados y los ya reportados mediante la solución exacta, notamos que el método variacional lineal a pesar de ser un método sencillo de implementar, nos proporciona valores bastante precisos.



# Capítulo 7

## Conclusiones y perspectivas

Al estudiar el sistema del OAUC dentro de una caja de longitud  $2a$  y paredes impenetrables mediante dos métodos de aproximación, teoría de perturbaciones independiente del tiempo a primer orden y el método variacional lineal, los resultados obtenidos para las energías propias del sistema, difieren en distintas cifras a medida que aumentamos el radio de confinamiento. Al comparar los resultados de ambos métodos de aproximación con los obtenidos mediante la solución exacta, cuyos valores propios son las raíces de la función hipergeométrica, concluimos que el método que mejor se aproxima es el método variacional lineal, proporcionando resultados con un alto grado de precisión, mientras que la aproximación mediante teoría de perturbaciones notamos que únicamente es válida para cuando la longitud de la caja es pequeña. De la comparación realizada con los eigenvalores de energía reportados en [1], podemos ver que la precisión de nuestros resultados es mayor.

Aplicando el método variacional lineal al sistema del OAIBC en una caja circular limitada por paredes impenetrables, desarrollando la función de onda aproximada en la base de una partícula confinada a moverse en una región circular; los resultados obtenidos para el espectro de energía son muy precisos, ya que si los comparamos con los obtenidos mediante la solución exacta, ambos resultados son muy parecidos. Como pudimos darnos cuenta a lo largo de este trabajo, el método variacional lineal es un método bastante sencillo de implementar y el tiempo de cómputo es pequeño, debido a que la convergencia en los valores de las energías del estado base y los primeros estados excitados se alcanzan rápidamente y solo requerimos de un total de cuarenta funciones base. Ahora, si queremos conocer los eigenvalores de energía para los otros estados excitados y asegurar un alto grado de precisión, basta con considerar un ma-



por número de funciones base.

Realizando un análisis de los valores propios de energía, obtenidos mediante el método variacional lineal, como función del radio de confinamiento, se observa que estos valores aumentan rápidamente conforme reducimos dicho radio. Por otra parte, a medida que aumentamos el radio de confinamiento, los valores propios de energía tienden a los del caso libre, tal como era de esperarse.

En general, la aplicación del método variacional lineal al sistema cuántico confinado que se estudió a lo largo de este trabajo, nos proporcionó resultados con un alto grado de precisión tales como, los eigenvalores de energía, funciones de onda y valores esperados de la posición.

Mediante el método variacional lineal es posible abordar problemas de frontera. Como trabajo a futuro podemos aplicar el método de encajonamiento para resolver problemas como el potencial de doble pozo y potenciales anarmónicos. Se puede calcular los eigenvalores de energía para un sistema de OAIBC en presencia de campo magnético sin incluir el spin. Otro de los sistemas confinados al cual podemos aplicar el método variacional lineal es el átomo de hidrógeno bidimensional confinado en presencia de un campo magnético uniforme incluyendo el spin del electrón, calcular los valores propios de energía y las probabilidades de transición.

# Referencias

- [1] Aguilera-Navarro V C, Ley-Koo E, and A Zimmerman. Perturbative, asymptotic and pade-approximant solutions for harmonic and inverted oscillator in a box. *J. Phys. A Math.*, **13**:3585–3598, Mayo 1980.
- [2] Michels, J. de Boer, and A. Bijl. *Physica*, 4:981, 1937.
- [3] Per Olaf Fröman, Staffan Yngve, and Nanny Fröman. The energy levels and the corresponding normalized wave functions for a model of a compressed atom. *J. Math. Phys.*, **28**:1813–1826, Agosto 1987.
- [4] Chaos-Cador and E. Ley Koo. Two-dimensional hydrogen atom confined in circles, angles, and circular sectors. *International Journal of Quantum Chemistry*, **103**:369–387, 2005.
- [5] N. Aquino, G. Campoy, and A. Flores-Riveros. Accurate energy eigenvalues and eigenfunctions for the two-dimensional confined hydrogen atom. *International Journal of Quantum Chemistry*, **103**:267–277, Febrero 2005.
- [6] J P Connerade, V K Dolmatov, and P A Lakshmi. The filling of shells in compressed atoms. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **33**:251–264, 2000.
- [7] A. L. Buchachenko. Compressed atoms. *Journal of Physical Chemistry*, **105**(25):5839–5846, Junio 2001.
- [8] W. Jaskólski. Confined many-electron systems. *Physics Reports*, **271**:1–66, 1996.
- [9] M. I. Molina. Ideal gas in a finite container. *Am. J. Phys.*, **64**, 1996.
- [10] G Campoy, N Aquino, and V D Granados. Energy eigenvalues and Einstein coefficients for the one-dimensional confined harmonic oscillator. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **35**:4903–4914, Mayo 2002.

- [11] N Aquino, E Castaño, G Campoy, and V Granados. Einstein coefficients and dipole moments for the asymmetrically confined harmonic oscillator. *European Journal of Physics*, **22**:645–656, Octubre 2001.
- [12] Richard Vawter. Effects of finite boundaries on a one-dimensional harmonic oscillator. *Physical Review*, **174**(3):749–757, Octubre 1968.
- [13] P. Ghosh, S. Ghosh, and N. Bera. Classical and revival time periods of confined harmonic oscillator. *Indian J. Phys.*, :157–166, Febrero 2015.
- [14] A. Consortini and B. R. Frieden. Quantum-mechanical solution for the simple harmonic oscillator in a box. *IL Nuovo Cimento*, **35**(2):153–164, Octubre 1976.
- [15] F. C. Auluck. Energy levels of an artificially bounded linear oscillator. *Proc. Nat. Inst. Sci. India*, 7(2):133–140, Mayo 1941.
- [16] F. C. Auluck. White dwarf and harmonic oscillator. *Proc. Nat. Inst. Sci. India*, 8(2):147–156, Junio 1942.
- [17] S. Chandrasekhar. The rate of escape of stars from clusters and the evidence for the operation of dynamical friction. *American Astronomical Society*, **II**:263–273, Enero 1943.
- [18] H E Montgomery Jr, G Campoy, and N Aquino. The confined N-dimensional harmonic oscillator revisited. *Phys. Scr.*, **81**, Marzo 2010.
- [19] Sami M. Al-Jaber. A confined n-dimensional harmonic oscillator. *Int. J. Theor. Phys.*, **47**:1853–1864, 2008.
- [20] Walter Greiner. *Quantum Mechanics an Introduction*. Capítulo 11, Springer, Fourth Edition (2001).
- [21] Ira N. Levine. *Quantum Chemistry*. Capítulo 8, Pearson, New York, Seventh Edition, (2014).
- [22] David S. Saxon. *Elementary Quantum Mechanics*. Capítulo VI, Holden-Day, (1968).
- [23] David J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. Prentice Hall, (1995).
- [24] Richard W. Robinett. *Quantum Mechanics*. Sección 8.2, Oxford, Second Edition (2006).

- [25] N. Aquino y E. Castaño. Efectos de confinamiento en átomos hidrogenoides bidimensionales. *Revista Mexicana de Física*, **44**:628–636, Diciembre 1998.
- [26] N. Aquino and E. Castaño. The confined two-dimensional hydrogen atom in the linear variational approach. *Revista Mexicana de Física*, **51**:126–131, Diciembre 2005.
- [27] N. Aquino and E. Castaño. La partícula dentro de una caja circular. *Contactos*, **26**:11–15, Diciembre 1998.
- [28] George B. Arfken and Hans J. Weber. *Mathematical Methods for Physicists*. Capítulo 11, Elsevier Academic Press, Sixth Edition, (2005).
- [29] R. W. Robinett. Visualizing the solutions for the circular infinite well in quantum and classical mechanics. *American Journal of Physics*, **64**(4):440–446, Abril 1996.
- [30] James B. Seaborn. *Hypergeometric Functions and Their Applications*. Capítulo 3, Springer, New York, (1991).
- [31] P. Dean. The constrained quantum mechanical harmonic oscillator. *Proc. Cambridge Phil.*, **62**:277–286, 1966.
- [32] Ipanaqué Chero and Velesmoro León. *Breve Manual de Mathematica 5.1*. Capítulo 2, Eumed.net, (2005).
- [33] Eugene Butkov. *Mathematical Physics*. Sección 9.7, Addison-Wesley, (1968).
- [34] G.N. Watson, Sc. D., and F. R. S. *A Treatise on the Theory of Bessel Functions*. Sección 5.14, Cambridge at the University Press, (1922).



# Apéndice



# Apéndice A

## Cálculo de la constante de normalización $C_{nm}$

Para encontrar la expresión de la constante  $C_{nm}$  de la ecuación (4.25) en la Sección 4.2, normalizamos a la unidad a  $R_{nm}(k_{nm}\rho)$  dado por

$$R_{nm}\left(X_{nm}\frac{\rho}{\rho_0}\right) = C_{nm}J_m(k_{nm}\rho),$$

entonces,

$$\int_0^{\rho_0} C_{nm}^2 J_m^2(k_{nm}\rho)\rho d\rho = 1, \quad (\text{A.1})$$

por lo que se necesita calcular esta integral. Para ello, regresamos a la ecuación (4.19),

$$\rho\frac{d}{d\rho}\left(\rho\frac{d}{d\rho}R(\rho)\right) + (k^2\rho^2 - m^2)R(\rho) = 0,$$

considerando que se satisface la condición de frontera dada por (4.15),

$$\psi(\rho = \rho_0, \phi) = 0.$$

Usamos que  $k = k_{nm}$  y sustituimos a  $R(\rho)$  por  $J_m(k_{nm}\rho)$ , obteniendo

$$\frac{d}{d\rho}\left(\rho\frac{d}{d\rho}J_m(k_{nm}\rho)\right) + \left(k_{nm}^2\rho - \frac{m^2}{\rho}\right)J_m(k_{nm}\rho) = 0. \quad (\text{A.2})$$



## A.0.

Ahora, consideremos un  $k$  arbitrario tal que  $J_m(k\rho)$  no necesita satisfacer la condición de frontera, entonces

$$\frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{d}{d\rho} J_m(k\rho) \right) + \left( k^2 \rho - \frac{m^2}{\rho} \right) J_m(k\rho) = 0, \quad (\text{A.3})$$

multiplicando a la ecuación (A.2) por  $J_m(k\rho)$  y (A.3) por  $J_m(k_{nm}\rho)$  y restando

$$\begin{aligned} & J_m(k\rho) \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{d}{d\rho} J_m(k_{nm}\rho) \right) - J_m(k_{nm}\rho) \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{d}{d\rho} J_m(k\rho) \right) + \\ & \left( k_{nm}^2 \rho - \frac{m^2}{\rho} \right) J_m(k_{nm}\rho) J_m(k\rho) - \left( k^2 \rho - \frac{m^2}{\rho} \right) J_m(k\rho) J_m(k_{nm}\rho) = 0, \end{aligned}$$

$$J_m(k\rho) \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{d}{d\rho} J_m(k_{nm}\rho) \right) - J_m(k_{nm}\rho) \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{d}{d\rho} J_m(k\rho) \right) = (k^2 - k_{nm}^2) \rho J_m(k\rho) J_m(k_{nm}\rho).$$

Integrando sobre el intervalo  $[0, \rho_0]$

$$\begin{aligned} & \int_0^{\rho_0} J_m(k\rho) \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{d}{d\rho} J_m(k_{nm}\rho) \right) d\rho - \int_0^{\rho_0} J_m(k_{nm}\rho) \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{d}{d\rho} J_m(k\rho) \right) d\rho \\ & = (k^2 - k_{nm}^2) \int_0^{\rho_0} \rho J_m(k\rho) J_m(k_{nm}\rho) d\rho. \quad (\text{A.4}) \end{aligned}$$

Sea

$$I_1 = \int_0^{\rho_0} J_m(k\rho) \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{d}{d\rho} J_m(k_{nm}\rho) \right) d\rho,$$

$$I_2 = \int_0^{\rho_0} J_m(k_{nm}\rho) \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{d}{d\rho} J_m(k\rho) \right) d\rho.$$

Integrando  $I_1$  e  $I_2$  por partes

$$u = J_m(k\rho) \implies du = \frac{d}{d\rho} J_m(k\rho) d\rho,$$

$$dv = \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{d}{d\rho} J_m(k_{nm}\rho) \right) d\rho \implies v = \rho \frac{d}{d\rho} J_m(k_{nm}\rho),$$

$$I_1 = J_m(k\rho) \rho \frac{d}{d\rho} J_m(k_{nm}\rho) \Big|_0^{\rho_0} - \int_0^{\rho_0} \rho \frac{d}{d\rho} J_m(k_{nm}\rho) \frac{d}{d\rho} J_m(k\rho) d\rho,$$

mientras que para  $I_2$

$$u = J_m(k_{nm}\rho) \implies du = \frac{d}{d\rho} J_m(k_{nm}\rho) d\rho,$$

$$dv = \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{d}{d\rho} J_m(k\rho) \right) d\rho \implies v = \rho \frac{d}{d\rho} J_m(k\rho),$$

$$I_2 = J_m(k_{nm}\rho) \rho \frac{d}{d\rho} J_m(k\rho) \Big|_0^{\rho_0} - \int_0^{\rho_0} \rho \frac{d}{d\rho} J_m(k\rho) \frac{d}{d\rho} J_m(k_{nm}\rho) d\rho,$$

al realizar la resta  $I_1 - I_2$ , es decir, regresando a la ecuación (A.4) se tiene que

$$J_m(k\rho) \rho \frac{d}{d\rho} J_m(k_{nm}\rho) \Big|_0^{\rho_0} - J_m(k_{nm}\rho) \rho \frac{d}{d\rho} J_m(k\rho) \Big|_0^{\rho_0} = (k^2 - k_{nm}^2) \int_0^{\rho_0} J_m(k\rho) J_m(k_{nm}\rho) \rho d\rho,$$

al evaluar los términos del lado izquierdo en  $\rho = 0$  se anulan, mientras que en  $\rho = \rho_0$  tenemos

$$\begin{aligned} J_m(k\rho_0) \rho_0 \left( \frac{d}{d\rho} J_m(k_{nm}\rho) \right) \Big|_{\rho=\rho_0} - J_m(k_{nm}\rho_0) \rho_0 \left( \frac{d}{d\rho} J_m(k\rho) \right) \Big|_{\rho=\rho_0} \\ = (k^2 - k_{nm}^2) \int_0^{\rho_0} J_m(k\rho) J_m(k_{nm}\rho) \rho d\rho, \end{aligned}$$

pero

$$J_m(k_{nm}\rho_0) = J_m(X_{nm}) = 0,$$

entonces

$$J_m(k\rho_0) \rho_0 J'_m(k_{nm}\rho_0) = (k^2 - k_{nm}^2) \int_0^{\rho_0} J_m(k\rho) J_m(k_{nm}\rho) \rho d\rho. \quad (\text{A.5})$$

Esta expresión aún es válida para toda  $k$  [33]. Derivando esta expresión con respecto de  $k$  obtenemos lo siguiente

$$\begin{aligned} \rho_0^2 J'_m(k\rho_0) k_{nm} J'_m(k_{nm}\rho_0) &= 2k \int_0^{\rho_0} J_m(k\rho) J_m(k_{nm}\rho) \rho d\rho \\ &+ k^2 \int_0^{\rho_0} J'_m(k\rho) J_m(k_{nm}\rho) \rho^2 d\rho \\ &- k_{nm}^2 \int_0^{\rho_0} J_m(k\rho) J'_m(k_{nm}\rho) \rho^2 d\rho, \end{aligned}$$

$$\rho_0^2 J'_m(k\rho_0)k_{nm} J'_m(k_{nm}\rho_0) = 2k \int_0^{\rho_0} J_m(k\rho)J_m(k_{nm}\rho)\rho d\rho + (k^2 - k_{nm}^2) \int_0^{\rho_0} J'_m(k\rho)J'_m(k_{nm}\rho)\rho^2 d\rho.$$

Si pedimos que  $J_m(k\rho)$  satisfaga la condición de frontera, esto es que  $k = k_{nm}$ , así, nuestra ecuación anterior se reduce a

$$\int_0^{\rho_0} (J_m(k_{nm}\rho))^2 \rho d\rho = \frac{\rho_0^2 (J'_m(k_{nm}\rho_0))^2}{2}. \quad (\text{A.6})$$

Regresando a la condición de normalización

$$C_{nm}^2 \int_0^{\rho_0} J_m^2(k_{nm}\rho)\rho d\rho = 1,$$

y sustituyendo la ecuación (A.6), que corresponde a la expresión hallada para la integral, se tiene lo siguiente

$$C_{nm}^2 \frac{\rho_0^2 (J'_m(k_{nm}\rho_0))^2}{2} = 1,$$

$$C_{nm}^2 = \frac{2}{\rho_0^2 (J'_m(k_{nm}\rho_0))^2}.$$

Utilizando que  $k_{nm} = X_{nm}/\rho_0$ , la ecuación anterior se reduce a

$$C_{nm}^2 = \frac{2}{\rho_0^2 (J'_m(X_{nm}))^2},$$

y haciendo uso de la siguiente relación de recurrencia de las funciones de Bessel [28],

$$J'_m(X_{nm}) = \frac{m}{X_{nm}} J_m(X_{nm}) - J_{m+1}(X_{nm}), \quad (\text{A.7})$$

pero sabemos que,  $J_m(X_{nm}) = 0$  ya que  $X_{nm}$  es un cero de la función de Bessel  $J_m$ , entonces

$$J'_m(X_{nm}) = -J_{m+1}(X_{nm}). \quad (\text{A.8})$$

Por tanto, la expresión para la constante de normalización está dada por

$$C_{nm} = \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{m+1}(X_{nm})}. \quad (\text{A.9})$$

## Apéndice B

# Adimensionalización del hamiltoniano del oscilador armónico isotrópico bidimensional

El hamiltoniano que queremos escribir de forma adimensional es el del oscilador armónico isotrópico bidimensional que es de la forma

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\rho^2. \quad (\text{B.1})$$

El operador laplaciano en coordenadas polares es

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2},$$

con lo que la ecuación de Schrödinger queda escrita como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\} \Psi + \frac{1}{2}m\omega^2\rho^2\Psi = E\Psi. \quad (\text{B.2})$$

Utilizando el método de separación de variables escribimos nuestra función de onda como  $\Psi(\rho, \phi) = R(\rho)\psi(\phi)$  donde  $\psi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{il\phi}$ , por lo que

$$\Psi(\rho, \phi) = R(\rho) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\phi}. \quad (\text{B.3})$$

## B.0.

Entonces

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) R(\rho) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\phi} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} R(\rho) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\phi} \right\} + \frac{1}{2} m\omega^2 \rho^2 R(\rho) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\phi} \\
& \qquad \qquad \qquad = ER(\rho) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\phi}, \\
& -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{dR(\rho)}{d\rho} \right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\phi} - \frac{1}{\rho^2} R(\rho) l^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\phi} \right\} + \frac{1}{2} m\omega^2 \rho^2 R(\rho) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\phi} \\
& \qquad \qquad \qquad = ER(\rho) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\phi}, \\
& -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{dR(\rho)}{d\rho} \right) - \frac{l^2}{\rho^2} R(\rho) \right\} + \frac{1}{2} m\omega^2 \rho^2 R(\rho) = ER(\rho). \quad (\text{B.4})
\end{aligned}$$

Ahora, definimos una nueva variable  $\xi = \frac{\rho}{a}$  o lo que es lo mismo  $\rho = a\xi$  donde  $a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ . Con esto, y aplicando la regla de la cadena tenemos que

$$\frac{d}{d\rho} = \frac{d\xi}{d\rho} \frac{d}{d\xi} = \frac{1}{a} \frac{d}{d\xi},$$

regresando a la ecuación (B.4)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{a\xi} \frac{1}{a} \frac{d}{d\xi} \left( a\xi \frac{1}{a} \frac{dR}{d\xi} \right) \right\} + \frac{\hbar^2 l^2}{2m} \frac{1}{a^2 \xi^2} R + \frac{1}{2} m\omega^2 a^2 \xi^2 R = ER.$$

Sustituyendo la expresión para  $a$  se tiene lo siguiente

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar\omega}{2} \left\{ \frac{1}{\xi} \frac{d}{d\xi} \left( \xi \frac{dR}{d\xi} \right) \right\} + \frac{\hbar\omega l^2}{2\xi^2} R + \frac{1}{2} \omega \hbar \xi^2 R = ER, \\
& -\frac{\hbar\omega}{2} \left\{ \frac{1}{\xi} \frac{d}{d\xi} \left( \xi \frac{dR}{d\xi} \right) - \frac{l^2}{\xi^2} R \right\} + \frac{1}{2} \omega \hbar \xi^2 R = ER, \\
& -\frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{\xi} \frac{d}{d\xi} \left( \xi \frac{dR}{d\xi} \right) - \frac{l^2}{\xi^2} R \right\} + \frac{1}{2} \xi^2 R = \frac{E}{\hbar\omega} R.
\end{aligned}$$

Haciendo  $\epsilon = \frac{E}{\hbar\omega}$  se obtiene:

$$-\frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{\xi} \frac{d}{d\xi} \left( \xi \frac{dR}{d\xi} \right) - \frac{l^2}{\xi^2} R \right\} + \frac{1}{2} \xi^2 R = \epsilon R,$$

$$-\frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi \frac{\partial}{\partial \xi} \right) + \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \right\} \Psi(\rho, \phi) + \frac{1}{2} \xi^2 \Psi(\rho, \phi) = \epsilon \Psi(\xi, \phi).$$

Por lo tanto nuestro hamiltoniano escrito de manera adimensional es

$$H = -\frac{1}{2} \nabla^2 + \frac{1}{2} \xi^2, \quad (\text{B.5})$$

donde la unidad de energía es  $\hbar\omega$  y la unidad de distancia en  $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ .



# Apéndice C

## Cálculo del término $W_{bb}$

Retomando la expresión de  $W_{bb}$  dada por la ecuación (6.16)

$$\begin{aligned} W_{bb} &= \int_0^{\rho_0} \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}) \frac{1}{2} \rho^2 \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 J_{|m|+1}(X_{n|m|})} J_{|m|}(X_{n|m|} \frac{\rho}{\rho_0}) \rho d\rho \\ &= \frac{1}{\rho_0^2 J_{|m|+1}^2(X_{n|m|})} \int_0^{\rho_0} J_{|m|}^2(X_{nm} \frac{\rho}{\rho_0}) \rho^3 d\rho, \end{aligned}$$

realizando el cambio de variable  $u = \frac{\rho}{\rho_0}$  entonces  $du = \frac{1}{\rho_0} d\rho$  y nuestros límites de integración ahora es de 0 a 1

$$\begin{aligned} W_{bb} &= \frac{1}{\rho_0^2 J_{|m|+1}^2(X_{n|m|})} \int_0^1 J_{|m|}^2(X_{nm} u) \rho_0^3 u^3 \rho_0 du \\ &= \frac{\rho_0^2}{J_{|m|+1}^2(X_{nm})} \int_0^1 J_{|m|}^2(X_{nm} u) u^3 du. \end{aligned} \quad (C.1)$$

Para calcular esta integral utilizamos la fórmula de Schafheitlin [34]

$$\begin{aligned} (\mu + 2) \int^z dx x^{\mu+2} J_\nu^2(x) &= (\mu + 1) \left\{ \nu^2 - \frac{(\mu + 1)^2}{4} \right\} \int^z dx x^\mu J_\nu^2(x) \\ &\quad + \frac{1}{2} \left[ z^{\mu+1} \left\{ z J'_\nu(z) - \frac{1}{2}(\mu + 1) J_\nu(z) \right\}^2 \right. \\ &\quad \left. + z^{\mu+1} \left\{ z^2 - \nu^2 + \frac{1}{4}(\mu + 1)^2 \right\} J_\nu^2(z) \right]. \end{aligned} \quad (C.2)$$

Haciendo un cambio de variable en la ecuación (C.1),  $x = X_{nm} u$  entonces  $dx = X_{nm} du$ , así nuestros límites de integración pasan a ser de 0 a  $X_{nm}$ ; en nuestro caso



**C.0.**

---

tenemos que  $\mu = 1$  y  $\nu = m$

$$\begin{aligned} W_{bb} &= \frac{\rho_0^2}{J_{|m|+1}^2(X_{nm})} \int_0^{X_{nm}} J_{|m|}^2(x) \left( \frac{x}{X_{nm}} \right)^3 \frac{1}{X_{nm}} dx \\ &= \frac{\rho_0^2}{X_{nm}^4 J_{|m|+1}^2(X_{nm})} \int_0^{X_{nm}} J_{|m|}^2(x) x^3 dx. \end{aligned}$$

Aplicando la fórmula dada por (C.2) a la integral inmediata anterior obtenemos lo siguiente;

$$\begin{aligned} W_{bb} &= \frac{\rho_0^2}{X_{nm}^4 J_{|m|+1}^2(X_{nm})} \frac{1}{3} \left\{ 2(m^2 - 1) \int_0^{X_{nm}} J_m^2(x) x dx \right. \\ &\quad + \frac{1}{2} \left[ X_{nm}^2 \{ X_{nm} J'_m(X_{nm}) - J_m(X_{nm}) \}^2 \right. \\ &\quad \left. \left. + X_{nm}^2 (X_{nm}^2 - m^2 + 1) J_m^2(X_{nm}) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (C.3)$$

pero  $J_m(X_{nm}) = 0$  entonces

$$W_{bb} = \frac{\rho_0^2}{X_{nm}^4 J_{|m|+1}^2(X_{nm})} \frac{1}{3} \left\{ 2(m^2 - 1) \int_0^{X_{nm}} J_m^2(x) x dx + \frac{1}{2} X_{nm}^4 J_m'^2(X_{nm}) \right\}. \quad (C.4)$$

Para calcular  $\int_0^{X_{nm}} J_m^2(x) x dx$ , regresamos a nuestra variable anterior  $u = \frac{x}{X_{nm}}$ ,

$$\int_0^{X_{nm}} J_m^2(x) x dx = X_{nm}^2 \int_0^1 J_m^2(X_{nm} u) u du.$$

Aquí, podemos aplicar la siguiente relación

$$\int_0^1 x J_k^2(\lambda x) dx = \frac{1}{2} \left[ J_k'^2(\lambda) + \left( 1 - \frac{k^2}{\lambda^2} \right) J_k^2(\lambda) \right], \quad (C.5)$$

donde,  $x = u$ ,  $\lambda = X_{nm}$  y  $k = m$ , entonces tenemos lo siguiente

$$\begin{aligned} \int_0^{X_{nm}} J_m^2(x) x dx &= X_{nm}^2 \int_0^1 J_m^2(X_{nm} u) u du \\ &= X_{nm}^2 \left\{ \frac{1}{2} \left[ J_m'^2(X_{nm}) + \left( 1 - \frac{l^2}{X_{nm}^2} \right) J_m^2(X_{nm}) \right] \right\} \\ &= \frac{X_{nm}^2}{2} J_m'^2(X_{nm}). \end{aligned} \quad (C.6)$$

Regresando a la ecuación (C.4)

$$W_{bb} = \frac{\rho_0^2}{X_{nm}^4 J_{|m|+1}^2(X_{nm})} \frac{1}{3} \left\{ 2(m^2 - 1) \frac{X_{nm}^2}{2} J_m'^2(X_{nm}) + \frac{1}{2} X_{nm}^4 J_m'^2(X_{nm}) \right\}, \quad (C.7)$$

utilizando que

$$-\frac{l}{X_{nm}} J_m(X_{nm}) + J_m'(X_{nm}) = -J_{m+1}(X_{nm}), \quad (C.8)$$

dado que  $X_{nm}$  es un cero de la función de Bessel, entonces  $J_m'(X_{nm}) = -J_{m+1}(X_{nm})$ .  
Por lo tanto

$$W_{bb} = \frac{\rho_0^2}{X_{nm}^4 J_{|m|+1}^2(X_{nm})} \frac{1}{3} \left\{ (m^2 - 1) X_{nm}^2 J_{m+1}^2(X_{nm}) + \frac{1}{2} X_{nm}^4 J_{m+1}^2(X_{nm}) \right\},$$

$$W_{bb} = \frac{\rho_0^2}{3} \left\{ \frac{m^2 - 1}{X_{nm}^2} + \frac{1}{2} \right\} \quad (C.9)$$



# Apéndice D

## Código del programa en Mathematica

```
Clear["Global*"]
l = 1; (*Numero cuantico de momento angular*)
base = 40; (*Numero de funciones base utilizadas*)
ceros = N[BesselJZero[l, Range[base]]]; (*Ceros de las funcion Bessel de
orden l*)
Delta[n_, m_] := 0 /; n != m;
Delta[n_, m_] := 1 /; n == m; (*Construccion de la matriz identidad*)
H1[i_, j_] := Delta[i, j] ceros[[i]]^2/(2 ro^2); (* Energia de la
particula en un circulo, elementos en la diagonal de la matriz
hamiltoniana*)
c[n_] := Sqrt[2]/(ro Abs[BesselJ[l+1, ceros[[n]]]]); (*Constante de
normalizacion para cada funcion de onda*)
d[n_, m_] := NIntegrate[BesselJ[l, ceros[[n]] u] u^3 BesselJ[l, ceros[[m]] u], {u
, 0, 1}]; (* Integrales para los elementos de matriz del potencial u^2
*)
H2[i_, j_] := c[i] c[j] d[i, j] (ro^4)/2; (* Elementos de matriz para el
potencial u^2/2 *)
Ham[n_, m_] := H1[n, m] + H2[n, m]; (* Matriz hamiltoniana completa *)
matrizH = Table[Ham[n, m], {n, 1, base}, {m, 1, base}]; (* Construccion de la
matriz hamiltoniana, especificando el tamaño de la base *)
Print[TimeUsed[] ]
ro = 1.5; (*Radio de confinamiento *)

energiasP = SetPrecision[Eigenvalues[matrizH], 50]; (*Eigenvalores de
energia del sistema*)
energias = Sort[energiasP]; (*Ordenamiento de los eigenvalores de menor a
mayor*)
```



----- Forwarded Message -----

From: Revista Mexicana de Física <rmf@ciencias.unam.mx>  
To: Norberto Aquino Aquino <naa@xanum.uam.mx>  
Sent: Fri, 11 Aug 2017 10:56:46 -0500  
Subject: NOTIFICATION OF ACCEPTANCE [UTF-8?]â€™Rev. Mex. Fis. Ref. No. 5402

Ref. No. 5402  
Section: Research

Dr. Norberto Aquino Aquino  
Departamento de Física  
Universidad Autónoma Metropolitana.

Dear Dr. Aquino Aquino:

We are pleased to inform you that your paper entitled:  
"The 1-dimensional confined harmonic oscillator revisited",  
by N. Aquino, E. Cruz,  
has been accepted for publication in the Revista Mexicana de Física.

The galley proofs will be sent to you shortly.

Yours sincerely,

Alejandro Ayala  
Chief Editor.

--

-----  
REVISTA MEXICANA DE  
FISICA  
Apartado Postal  
70-348  
Delegación  
Coyoacán  
04510 Ciudad de  
México.  
Tel/Fax: (+52-55)5622-4946 (+52-55)  
5622-4993  
e-mail: [rmf@ciencias.unam.mx](mailto:rmf@ciencias.unam.mx)  
<http://rmf.smf.mx/>

----- End of Forwarded Message -----

# The 1-dimensional confined harmonic oscillator revisited

N. Aquino and E. Cruz

*Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa,  
Av. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, 09340, Ciudad de México, México.  
e-mail: naa@xanum.uam.mx*

Received 19 June 2017; accepted 11 August 2017

We study the size effect on the energy levels of the 1-dimensional harmonic oscillator confined within a box of with impenetrable walls and large  $L$ . We use the particle in a box basis set to diagonalize the Hamiltonian of the confined harmonic oscillator. In this way we obtain the energy eigenvalues and eigenfunctions as a functions of  $L$ . We compare our numerical results with those reported in literature finding good agreement with the exact ones.

*Keywords:* Confined harmonic oscillator; energy eigenvalues; linear variational method.

*PACS:* FAVOR DE PROPORCIONAR

## 1. Introduction

The idea of the spatial confinement of quantum systems has gained growing interest in recent years due to its potential ability to model a great number of applications in different areas of Physics and Chemistry, as it is shown in several reviews and books [1-8].

A spatially confined quantum system is defined as that in which its state functions satisfy certain boundary conditions for a finite value of the spatial coordinates [1]. The one-dimensional (1-D) harmonic oscillator limited by impenetrable walls is called 1-D confined harmonic oscillator (CHO).

The 1-D confined harmonic oscillator has been used as a model to study some more complicated systems, as for example: the proton-deuteron transformation to generate energy in dense stars [9-10]; in the theory of white dwarfs [11]; in the escape velocity of a star from a galaxy or a globular cumulus [12]; in the calculation of the specific heat of a crystal subjected to high external pressures [14]; in magnetic properties of metals [15]; in the study of color centers. More recently, the dynamics of a CHO subjected to a static electric field and a strong laser field has been studied [39], it has called attention because it could be used to understand some aspects of the dynamics of ions caught in a Paul trap and in the study of the time of the revival of a particle in a CHO. Also few studies have been made on the transition probabilities and Einstein coefficients of the 1-D confined harmonic oscillator [20,34,35] as a function of the box size, showing that new allowed transitions appear as a result of the confinement, this fact may be of technological interest.

Perhaps the first ones who studied the problem of the 1-D confined harmonic oscillator were Kothari and Auluck [9-11]. Y in the decade of the 40's. They found that the eigen-functions of the system could be written in terms of Kummer's functions. To obtain the values of the energy they needed to find the zeroes of the confluent hypergeometric function. They decided to carry out expansions and approaches to the hypergeometric function to obtain an analytical expression for the energy as a function of box size. They

found the correct qualitative behavior; the energy of the levels of the CHO increases fast as the size of the box diminishes. Few years ago Baijal and Singh [20] decided to get the zeroes of the hypergeometric function in a numerical way but their results were not accurate. Vawter [26,27] improved the numerical results found by Baijal and Singh [20]. At the beginning of 1980, Aguilera-Navarro *et al.* [30] used the linear variational method to find, in a numerical way, the eigen-energies and eigen-functions of the CHO problem. They diagonalized the Hamiltonian matrix in the basis set of the free particle in a box of impenetrable walls. They obtained numerical values more accurate than those reported previously. However, the accuracy of their results is lower than the number of decimals that they reported.

The purpose of this work is to show the way in which the results of Aguilera-Navarro *et al.* [30] can be improved.

The content of this work is as follows: In Sec. 2 we present the exact solution of the CHO problem. In Sec. 3 we use the linear variational method to obtain the energy eigenvalues. Finally, in section 4 we discuss our results and we give our conclusions.

## 2. The exact solution

The Schrödinger equation for the *free 1-D harmonic oscillator* (in natural units,  $m = \omega = \hbar = 1$ ) is given by

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2\right) \psi(x) = E \psi(x), \quad (1)$$

where the unit of the distance is  $\sqrt{\hbar/m\omega}$  and the energy is in units of  $\hbar\omega$ .

In order to find the solutions of Eq. (1) we make the following substitution

$$\psi(x) = f(x) e^{-\frac{1}{2}x^2}, \quad (2)$$

where  $f(x)$  satisfies the following equation

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} - 2x \frac{df(x)}{dx} + (\mu - 1)f(x) = 0, \quad (3)$$

where  $\mu = 2E$ .

Now we make a change of variable, by defining

$$\rho = x^2, \quad (4)$$

then the Eq. (3) is transformed to

$$\rho \frac{d^2 f(\rho)}{d\rho^2} + \left(\frac{1}{2} - \rho\right) \frac{df(\rho)}{d\rho} - \frac{1}{4}(1 - \mu)f(\rho) = 0. \quad (5)$$

This equation is identified as the Kummer differential equation. Its general solution, in terms of  $x$ , is given by:

$$f(x) = a {}_1F_1 \left[ \frac{1}{4}(1 - 2E); \frac{1}{2}; x^2 \right] + bx {}_1F_1 \left[ \frac{1}{4}(3 - 2E); \frac{3}{2}; x^2 \right], \quad (6)$$

where  $a$  and  $b$  are constants and  ${}_1F_1$  is the hypergeometric function [37,38].

The potential energy of Eq. (1) is a symmetric function of  $x$ , therefore the eigenstates of the Schrödinger equation have definite parity; odd or even.

$$\psi^+(x) = Ae^{-x^2/2} {}_1F_1 \left[ \frac{1}{4}(1 - 2E); \frac{1}{2}; x^2 \right],$$

$$\psi^-(x) = Be^{-x^2/2} x {}_1F_1 \left[ \frac{1}{4}(3 - 2E); \frac{3}{2}; x^2 \right], \quad (7)$$

where  $+$  and  $-$  indicate even and odd parity respectively.

In order that the wave functions do not diverge as  $x \rightarrow \pm\infty$ , the hypergeometric function must terminate, this fact requires that there exist some non negative integer  $n$  such that

$$E = n + \frac{1}{2}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (8)$$

On the other hand, the exact solutions for the  $1-D$  confined harmonic oscillator are well known [9,10,20,21,25,30], they are obtained as follows. When the harmonic oscillator is symmetrically confined in a box, of length  $L = 2a$ , of impenetrable walls, the energy quantization results from the boundary conditions on the wave functions

$$\psi^\pm(x = -a) = \psi^\pm(x = a) = 0. \quad (9)$$

TABLE I. Ground state energy for 1-D confined harmonic oscillator for few states  $n$  and different box sizes  $a$ . In the first row are the calculations of Aguilera-Navarro *et al.* [30]. In the second row are the calculations of the present work, all calculations were carried out with  $N = 35$  functions of the basis set. Finally, in the third row are the exact results obtained with the method described in the Sec. 2 and in the references [16,17].

$n = 1, a = 0.5$	$n = 1, a = 1.0$	$n = 1, a = 5.0$
4.951129323264	1.298459831928	0.4999999999
4.951129323254131	1.298459832032074	0.500000000076717
4.951129323254130411	1.298459832032056693	0.500000000076717131
$n = 2, a = 0.5$	$n = 2, a = 1.0$	$n = 2, a = 5.0$
19.774534178560	5.075582014976	1.5000000035
19.774534179208319	5.075582015226848	1.50000003671584
19.774534179208319898	5.075582015226783066	1.50000003671583931
$n = 3, a = 0.5$	$n = 3, a = 1.0$	$n = 3, a = 5.0$
44.452073828864	11.258825780608	2.500000083
44.452073829740951	11.258825781483075	2.500000084018827
44.452073829740951520	11.258825781482910495	2.500000084018818194
$n = 4, a = 0.5$	$n = 4, a = 1.0$	$n = 4, a = 5.0$
78.996921150976	19.4996964993	3.50000122
78.996921150747461	19.899696501830355	3.500001221456171
78.996921150747460050	19.899696501830088806	3.500001221456053750
$n = 10, a = 0.5$	$n = 10, a = 1.0$	$n = 10, a = 5.0$
493.521634054144	123.53575010	9.53657297
493.521634068787858	123.535750114017713	9.536572972710428
493.521634068787881046	123.535750114015911050	9.536572970482361980
$n = 20, a = 0.5$	$n = 20, a = 1.0$	$n = 20, a = 5.0$
1973.962483650560	493.6466444	24.0826131
1973.962483731369757	493.646644463589652	24.082613154145415
1973.962483731369659659	493.646644463580497219	24.082613059260975237



The eigen-energies are found as the successive roots of the following equations:

$${}_1F_1 \left[ \frac{1}{4} (1 - 2E); \frac{1}{2}; a^2 \right] = 0, \quad \text{for even states}$$

$${}_1F_1 \left[ \frac{1}{4} (3 - 2E); \frac{3}{2}; a^2 \right] = 0, \quad \text{for odd states} \quad (10)$$

To determine the energy eigenvalues from these equations, it is necessary to solve numerically for one of the boundary conditions (9) according to the symmetry of the problem. The allowed energies can be determined with high accuracy by using some computer algebra system, Montgomery *et al.* [16-17] used Maple but we can use Mathematica or a Fortran compiler with subroutines of extended precision. The numerical results obtained by solving the Eq. (10) with Mathematica 9 are reported in Table I.

### 3. Linear variational approach

The Schrödinger equation independent of time is given by

$$H\Psi = E\Psi. \quad (11)$$

We use the linear variational method to solve the eigenvalue Schrödinger equation. The wavefunction  $\Psi$  is expanded as

$$\Psi = \sum_{i=1}^N c_i \phi_i. \quad (12)$$

where  $\{c_i\}$  are constants to determine and  $\{\phi_i\}$  is an orthonormal basis set.

The solution of eigen-value problem (Eq. 11) is equivalent to find the solutions of

$$(\mathbf{H} - E\mathbf{I})\vec{c} = 0, \quad (13)$$

where  $\vec{c} = (c_1, c_2, c_3, \dots, c_N)$  is the vector of coefficients and  $\mathbf{I}$  is the identity matrix, and

$$H_{ij} = \langle \phi_i | H | \phi_j \rangle, \quad (14)$$

are the elements of the Hamiltonian matrix.

It is convenient to write the CHO Hamiltonian in the following way:

$$H = H^0 + H'. \quad (15)$$

Where  $H' = (1/2)x^2$  and  $H^0$  is the Hamiltonian of a free particle in a box:

$$H^0 = \frac{p^2}{2} + V_c, \quad (16)$$

in which the potential is given by

$$V_c = \begin{cases} 0, & |x| < a \\ \infty, & |x| > a. \end{cases} \quad (17)$$

The energy eigenvalues  $E_n^0$  and eigenfunctions  $\phi_n$  of  $H^0$  are well known:

$$E_n^0 = \frac{n^2 \pi^2}{8a^2}, \quad (18)$$

and

$$\phi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{1/a} \cos(n\pi x/2a), & n = 1, 3, 5, \dots \\ \sqrt{1/a} \sin(n\pi x/2a), & n = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (19)$$

The Hamiltonian matrix elements are:

$$H_{ij} = H_{ij}^0 + H'_{ij}, \quad (20)$$

in which

$$H_{ij}^0 = E_i^0 \delta_{ij}, \quad (21)$$

where  $\delta_{ij}$  is the Kronecker delta.

The Hamiltonian  $H$  (Eq. 15) is symmetric, therefore its eigen-functions have definite parity, *even* or *odd*. For even (odd) states, the expansion in (Eq. 12) includes only even (odd) states as given by Eq. (19).

The matrix elements  $H'_{ij}$  are analytical.

For even states they are:

$$H'_{ij} = \begin{cases} \frac{L^2 (-6 + (1 - 2j)^2 \pi^2)}{24(\pi - 2j\pi)^2}, & \text{if } i = j \\ \frac{(-1)^{i+j} L^2 \left( \frac{1}{(i-j)^2} - \frac{1}{(-1+i+j)^2} \right)}{4\pi^2}, & \text{if } i \neq j, i, j = 1, 2, 3, \dots \end{cases} \quad (22)$$

Whereas for odd states we have

$$H'_{ij} = \begin{cases} \frac{L^2}{48} \left( 2 - \frac{3}{i^2 \pi^2} \right) & \text{if } i = j \\ \frac{(-1)^{i+j} L^2 i j}{(i^2 - j^2)^2 \pi^2}, & \text{if } i \neq j, i, j = 1, 2, 3, \dots \end{cases} \quad (23)$$

Where  $L = 2a$ .

## 4. Results and discussion

The diagonalization of the CHO Hamiltonian was already employed by Aguilera-Navarro, Ley-Koo and Zimmerman [30] in 1980, and subsequently used again by Taseli and Safer [36] at the end of the 90's. In Table I we show the calculations obtained in the present work with those obtained by Aguilera-Navarro *et al.* [30] and with the exact ones [16]. Our calculations were made by using Mathematica 9 with real variables with 25 decimal places. For comparison we used the same number of basis set,  $N = 35$ , as Aguilera-Navarro *et al.* [30].

We compare our results with the exact ones obtained by Montgomery *et al.* [16,17], and we find that the present calculations have the precision shown in Table I.

In Table I we can see that the accuracy in the calculations of reference [30] is lower than the results of the present study. The reason for this difference is due to the fact that in the early 80's the diagonalization subroutines were not as efficient and accurate as they are today, and it could also be due to the fact that the calculations with double precision real variables could only handle 16 decimal places.

As we can see there is an improvement in the accuracy of the energy eigenvalues for boxes with  $a < 5$ . While for  $a = 5$  the accuracy of results of the present report and those of reference [30] is the same. To improve the accuracy of the results of the present work it is necessary to increase the number of functions of the basis set to reach the exact results. In an Appendix we show the Mathematica procedure used to obtain the results presented in this work.

## appendix

(\* Mathematica procedure to find the energy-eigenvalues \*)

```
Clear["Global*"]
delta[n_, m_] := KroneckerDelta[n, m](* Identity matrix *)
(* Even states *)
v[n_, m_] := 1/\[Pi]^2 (-1)^(m + n) a^2 (1/(m - n)^2 - 1/(-1 + m + n)^2) /; n != m;
(* non-diagonal elements of the harmonic oscillator potential (1/2)x^2 *)
v[n_, m_] := (a^2 (-6 + (1 - 2 n)^2 \[Pi]^2))/(6 (\[Pi] - 2 n \[Pi])^2) /; n == m;
(* Diagonal elements of the harmonic oscillator potential (1/2)x^2 *)
d[n_] := ((2 n - 1)^2 \[Pi]^2)/(8 a^2);(* Energy eigenvalues of a particle in a box *)

(* Odd states; replace the three functions defined before by the followin lines *)

v[n_, m_] := (4 (-1)^(m + n) a^2 m n)/((m - n)^2 (m + n)^2 \[Pi]^2) /; n != m;
v[n_, m_] := 1/12 a^2 (2 - 3/(n^2 \[Pi]^2)) /; n == m;
d[n_] := ((2 n)^2 \[Pi]^2)/(8 a^2);

Hnm[n_, m_] := SetPrecision[N[(d[n]) (delta[n, m]) + v[n, m], 25], 25];(* Hamiltonian matrix *)
base = 35;(* Number of functions of the basis set *)
matrizH = Table[Hnm[n, m], {n, 1, base}, {m, 1, base}];
Print[TimeUsed[]]
a = 0.2;(* Box lenght *)
energias = SetPrecision[Eigenvalues[matrizH], 25];(* Energy eigenvalues *)
Sort[SetPrecision[energias, 25]]
```

## Acknowledgments

We thank S.A. Cruz, J. Garza and the two anonymous referees for their comments. E. Cruz thank CONACYT for the financial support through the scholarship 576678.

- 
1. F.M. Fernández and E.A. Castro, *Kinam* **4** (1982) 193.
  2. P. O. Fröman, S. Yngve, N. J. Fröman, *J. Math. Phys.*, **28** (1987) 1813.
  3. S.J. Yngve, *J. Math Phys.* **29** (1988) 931.
  4. W. Jaskólski, *Phys. Rep.*, **271** (1996) 1.
  5. A.L. Buchachenko, *J. Phys. Chem.* **105** (2001) 5839.
  6. J.P. Connerade, V.H. Dolmatov and P.A. Lakshmi, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33** (2000) 251.

7. J.R. Sabin, E. Brändas and S.A. Cruz, Editors, *Advances in Quantum Chemistry*, vol. **57** and **58**, (Academic Press, Amsterdam 2009).
8. K.D. Sen, Editor, *Electronic Structure of Quantum Confined Atoms and Molecules*, (Springer, New York 2014).
9. F.C. Auluck, *Proc. Nat. Inst. Sci. India* **7** (1941) 133.
10. D.S. Kothari and F.C. Auluck, *Science and Culture* **6** (1940) 370.
11. F.C. Auluck, *Proc. Nat. Inst. Sci. India* **8** (1942) 147.
12. S. Chandrasekhar, *Astrophys. J.* **97** (1943) 263.
13. E.M. Korson and I. Kaplan, *Phys. Rev.* **71** (1947) 130.
14. N. Aquino, V. Granados and H. Yee–Madeira *Rev. Mex. Fis.* **55** (2009) 125.
15. R.B. Dingle, *Proc. R. Soc. London A* **212** (1952) 47.
16. H.E. Montgomery Jr., N. Aquino and G. Campoy, *Phys. Scr.* **81** (2010) 045010.
17. H.E. Montgomery Jr., G. Campoy and N. Aquino, *Phys. arXiv:0803.4029v1[math-ph]* 28 Mar 2008.
18. F.C. Auluck, *Proc. Nat. Inst. Sci. India* **7** (1941) 383.
19. F.C. Auluck and D.S. Kothari, *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **41** (1945) 175.
20. J.S. Bajjal and K.K. Singh, *Progr. Theoret. Phys. (Kyoto)* **14** (1955) 214.
21. T.E. Hull and R.S. Julius, *Can. J. Phys.* **34** (1956) 914.
22. S. Sengupta and S. Gjosh, *Phys. Rev.* **115** (1959) 1681.
23. K.K. Singh, *Physica*, **30**, (1964) 211.
24. B. Suryan, *Phys. Rev.* **71**, (1947) 741.
25. P. Dean, *Proc. Cambridge Phil. Soc.* **62** (1966) 277.
26. R. Vawter, *Phys. Rev.* **174** (1968) 749.
27. R. Vawter, *J. Math. Phys.* **14** (1973) 1864.
28. A. Consortini and B. R. Frieden, *Nuovo Cimento* **35B** (1976) 153.
29. F.C. Rotbart, *J. Phys. A: Math. Gen.* **11** (1978) 2363.
30. V.C. Aguilera-Navarro, E. Ley-Koo and A.H. Zimmerman, *J. Phys. A: Math. Gen.* **13** (1980) 3585.
31. F. M. Fernández and E. A. Castro, *Phys. Rev. A* **24** (1981) 2883; G. A. Arteca, S.A. Maluendes, F.M. Fernández and E.A. Castro, *Int. J. Quantum Chem.* **24** (1983) 169.
32. J. Garza, R. Vargas and A. Vela, *Phys. Rev.* **E53** (1996) 1954.
33. J.L. Marín and S.A. Cruz, *Am. J. Phys.* **59** (1991) 931.
34. N. Aquino, E. Castaño, G. Campoy and V. Granados, *Eur. J. Phys.* **22** (2001) 645.
35. G. Campoy, N. Aquino and V.D. Granados, *J. Phys. A* **35** (2002) 4903.
36. H. Taseli and A. Zafer, *Int. J. Quantum Chem.* **61** (1997) 759.
37. NIST Digital library of Mathematical Functions, freely available at <http://dlmf.nist.gov/>, Chapter 13; M. Abramowitz and I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, (Dover New York 1965) p.504.
38. J.B. Seaborn, *Hypergeometric Functions and Their Applications*, (Springer, New York, 1991) Chap. 3.
39. S. Lumb, S. Lumb and V. Prasad, *J. Mod. Phys.* **4** (2013) 1139.