

Universidad Nacional de Ingeniería

Facultad de Ciencias



TESIS

La Función de Green y el método Monte Carlo en la solución de
problemas sencillos en Mecánica Cuántica

Para obtener el Título Profesional de Licenciado en Física

Elaborado por

Juan Rosas Portuguez Gonzales

ORCID: 0009-0000-4375-816X

Asesor

Dr. Héctor Raúl Loro Ramírez

ORCID: 0000-0002-5965-6771

LIMA-PERÚ

2024

Citar/How to cite	Portuguez Gonzales [1]
Referencia/Refererence	[1] J. Portuguez Gonzales, " <i>La Función de Green y el método Monte Carlo en la solución de problemas sencillos en Mecánica Cuántica</i> " [Tesis]. Lima (Perú): Universidad Nacional de ingeniería, 2024.
Estilo/Style IEEE (2020)	

Citar/How to cite	(Portuguez, 2024)
Referencia/Refererence	Portuguez, J. (2024). <i>La Función de Green y el método Monte Carlo en la solución de problemas sencillos en Mecánica Cuántica</i> [Tesis:Universidad Nacional de Ingeniería]. Repositorio Institucional Cybertesis UNI.
Estilo/Style APA(7ma ed.)	

Dedicatoria

Este trabajo se lo dedico a los científicos
e ingenieros, eternos forjadores
de nuestro futuro.

Agradecimientos

A toda la comunidad de mi alma mater, la Universidad Nacional de Ingeniería y principalmente a todos los profesores de la Facultad de Ciencias, especialidad de Física, en especial aquellos de quienes tuve la oportunidad de recibir sus conocimientos técnicos, tecnológicos y científicos, bases fundamentales de mi carrera profesional y mi formación científica.

Además quiero expresar mi profundo agradecimiento póstumo al profesor Holger Valqui, los profesores Héctor Loro Ramirez y Orlando Pereyra Ravinez quienes me alentaron y colaboraron para continuar este trabajo de investigación. Asimismo a mis padres quienes me apoyaron económicamente en esta tarea.

Resumen

Se aplica el método de la Función de Green y el método Monte Carlo a los problemas del pozo infinito, el oscilador armónico simple, la ecuación radial del átomo de Hidrógeno y al problema de una partícula en el potencial de Airy, para encontrar las funciones de onda y la energía del estado fundamental de estos sistemas.

Usando el método de Green estos cálculos se hacen hasta tercer orden, mientras que usando el método Monte Carlo estos cálculos se hacen hasta encontrar una convergencia adecuada. Los resultados son satisfactorios y es posible aplicar estas técnicas cuando no se pueda encontrar una solución analítica a un problema planteado.

Abstract

The Green's Function method and the Monte Carlo method are applied to the problems of the infinite well, the simple harmonic oscillator, the radial equation of the Hydrogen atom and the problem of a particle in an Airy potential, to find the wave functions and the energy of the ground state of these systems.

Using Green's method, these calculations are done up to third order, while using the Monte Carlo method these calculations are made until an adequate convergence is found. The results are satisfactory and it is possible to apply these techniques when you cannot find an analytical solution to a given problem.

Tabla de Contenido

Resumen	v
Abstract	vi
Introducción	xvii
Capítulo I La Función de Green y el Método Monte Carlo	1
1.1 Función de Green	1
1.2 El Método Monte Carlo	5
Capítulo II Aspecto Teórico	7
2.1 Partícula en un pozo infinito unidimensional	7
2.1.1 Función de Green para el Pozo Infinito Unidimensional	9
2.2 El Oscilador Armónico Simple en una dimensión	11
2.2.1 Función de Green para el Oscilador Armónico Simple	15
2.3 El átomo de Hidrógeno	18
2.3.1 Función de Green para el átomo de Hidrógeno	22
2.4 El Potencial de Airy	25
2.4.1 Función de Green para el potencial de Airy	26

Capítulo III Resultados numéricos usando el método de la función de Green	29
3.1 Cálculo de la función de onda y la energía del estado fundamental del Pozo Infinito en una dimensión usando el método de la función de Green	29
3.1.1 Cálculo de la función de onda del estado fundamental y su energía en primera aproximación	29
3.1.2 Cálculo del autovalor λ en primera aproximación	31
3.1.3 Cálculo del autovalor λ para otras aproximaciones	32
3.1.4 Resultados numéricos	34
3.2 Cálculo de la función de onda del estado fundamental del Oscilador Armónico y su energía usando el método de la función de Green	41
3.2.1 Resultados numéricos	42
3.3 Cálculo de la parte radial de la función de onda del estado fundamental del átomo de Hidrógeno y su energía usando el método de la función de Green .	47
3.3.1 Resultados numéricos	50
3.4 Cálculo de la función de onda del estado fundamental y su energía para una partícula en el potencial de Airy en una dimensión usando el método de la función de Green	56
3.4.1 Resultados numéricos	59
Capítulo IV Resultados numéricos usando el método Monte Carlo y la función de Green	68
4.1 Cálculo de integrales usando el método Monte Carlo	68

4.2	Cálculo de la función de onda y la energía del estado fundamental para el Pozo Infinito usando el método Green-Monte Carlo	69
4.3	Cálculo de la función de onda y la energía del estado fundamental para el oscilador armónico simple usando el método Green-Monte Carlo	76
4.4	Cálculo de la función de onda y la energía del estado fundamental del átomo de Hidrógeno usando el método Green-Monte Carlo	83
4.5	Cálculo de la función de onda y la energía del estado fundamental de una partícula en el potencial de Airy usando el método Green-Monte Carlo	88
	Conclusiones	96
	Referencias Bibliográficas	97
	Anexos	98

Lista de Tablas

Tabla 1. Valores de $G(x, h)$ del pozo infinito para valores de x entre 0 y 2 con un paso de 0,25.	35
Tabla 2. Función de onda del estado fundamental en primera aproximación del pozo infinito para valores de x entre 0 y 2 con un paso de 0,25.	35
Tabla 3. Valores de $h(j)$, $x(i)$ y $G(x, h)$ para valores de x y h entre 0 y 2.	36
Tabla 4. Función de onda $\phi^{(2)}(x_i)$ del estado fundamental en segunda aproximación y normalizada $\phi_n^{(2)}(x_i)$	39
Tabla 5. Función de onda del estado fundamental en tercera aproximación del pozo infinito para valores de x entre 0 y 2 con un paso de 0,25	39
Tabla 6. Valores de n_i y $\lambda^{(i)}$ para las tres primeras iteraciones en el pozo infinito . . .	40
Tabla 7. Valores de $G(x, h)$ del oscilador armónico para valores de x entre -2 y 2 con un paso de 0,5	42
Tabla 8. Función de onda del estado fundamental en primera aproximación del oscilador armónico para valores de x entre -2 y 2 con un paso de 0,5	42
Tabla 9. Valores de $h(j)$, $x(i)$ y $G(x, h)$ para valores de x y h entre 0 y 2	43
Tabla 10. Función de onda del estado fundamental en segunda aproximación del oscilador armónico para valores de x entre -2 y 2 con un paso de 0,5	45

Tabla 11. Función de onda del estado fundamental en tercera aproximación del oscilador armónico para valores de x entre -2 y 2 con un paso de 0,5	45
Tabla 12. Valores de N y $\lambda^{(i)}$ para las tres primeras iteraciones en el oscilador armónico simple	46
Tabla 13. Valores de $G(x, h)$ del átomo de Hidrógeno para valores de x entre 0,005 y 4. El paso entre 0,5 y 4 es de 0,5.	50
Tabla 14. Función de onda del estado fundamental en primera aproximación del átomo de Hidrógeno de x entre 0,005 y 4. El paso entre 0,5 y 4 es de 0,5.	50
Tabla 15. Valores de $h(j)$, $x(i)$ y $G(x, h)$ para valores de x y h entre 0 y 2	50
Tabla 16. Función de onda del estado fundamental en 2da, 3era, 4ta y 5ta aproximación del átomo de Hidrógeno de x entre 0,005 y 4. El paso entre 0,5 y 4 es de 0,5.	54
Tabla 17. Función de onda del estado fundamental en 6ta, 7ma, 8va y 9na aproximación del átomo de Hidrógeno de x entre 0,005 y 4. El paso entre 0,5 y 4 es de 0,5	54
Tabla 18. Función de onda del estado fundamental en 10ma, 11ava, 12ava y 13ava aproximación del átomo de Hidrógeno de x entre 0,005 y 4. El paso entre 0,5 y 4 es de 0,5	55
Tabla 19. Valores de $\lambda^{(i)}$ para las trece primeras iteraciones en el caso del átomo de Hidrógeno	56
Tabla 20. Valores de $G(x, h)$ para una partícula en el potencial de Airy, con x entre 0,81 y 11,34. El paso es de 0,81.	59
Tabla 21. Valores de $h(j)$, $x(i)$ y $G(x, h)$ para valores de x y h entre 0,81 y 10,53	60

Tabla 22. Función de onda del estado fundamental en primera, segunda y tercera aproximación para el potencial de Airy, con valores de x entre 0,81 y 10,53 con un paso de 0,81. 67

Tabla 23. Valores de $\lambda^{(i)}$ para las tres primeras iteraciones en el caso de una partícula en el potencial de Airy. 67

Lista de Figuras

Figura 1. Representación por flechas verticales de cinco valores de números aleatorios escogidos en el intervalo (a,b).	6
Figura 2. Función de onda del estado fundamental (1) y del primer estado excitado (2) para el problema de una partícula en un pozo de potencial infinito.	8
Figura 3. Gráfico de la Función de onda del estado fundamental del oscilador armónico simple.	14
Figura 4. Gráfico de la parte radial de la Función de onda del estado fundamental del átomo de Hidrógeno.	22
Figura 5. Potencial de Airy usado en el cálculo. Este potencial es similar al que se usa en la referencia Gilbert-1991	27
Figura 6. Gráfico de la función de Green con punto de aplicación h en el intervalo de (0,a).	30
Figura 7. Gráfica de las tres primeras aproximaciones para la función de onda normalizada $\phi_n(x)$ del pozo infinito correspondientes a los datos de las tablas 2, 4 y 5.	40
Figura 8. Gráfica de las tres primeras aproximaciones para la función de onda normalizada $\phi_n(x)$ del oscilador armónico correspondientes a los datos de las tablas 8, 10 y 11.	46

Figura 9. Representación de la Función de Green y los pasos en x usados en el cálculo para el átomo de Hidrógeno.	48
Figura 10. Gráfico de la 1era, 2da, 3era, 4ta, 9na y 13ava aproximación de $ \phi_n(x) ^2$ del átomo de Hidrógeno. Datos tomados de las tablas 14, 16, 17 y 18.	55
Figura 11. Representación de la Función de Green y los pasos en x usados en el cálculo para una partícula en el potencial de Airy.	58
Figura 12. Gráfica de las tres primeras aproximaciones para el cuadrado de la función de onda normalizada $\phi_n(x)$ del potencial de Airy correspondientes a los datos de la tabla 22.	66
Figura 13. La figura muestra cuatro números arbitrarios elegidos entre A y B.	68
Figura 14. Cuadrado de la función de onda del estado fundamental del pozo infinito en primera aproximación, usando el método de Green Monte Carlo para 5 puntos aleatorios y los puntos extremos fijos.	71
Figura 15. Cuadrado de la función de onda del estado fundamental del pozo infinito en segunda aproximación, usando el método de Green Monte Carlo para 5 puntos aleatorios y los puntos extremos fijos.	72
Figura 16. Función de onda del estado fundamental en primera, segunda, tercera y cuarta aproximación para el pozo infinito calculada usando el Método Green Monte Carlo, considerando 50 puntos entre 0 u.a. y 2 u.a.	74
Figura 17. Función de onda para el estado fundamental del pozo infinito calculada usando el Método Green Monte Carlo, considerando 1000 puntos entre 0 u.a. y 2 u.a.	75

Figura 18. Cuadrado de la función de onda en primera aproximación para el oscilador armónico usando el método de Green Monte Carlo para 6 puntos aleatorios y los puntos extremos.	78
Figura 19. Cuadrado de la función de onda en segunda aproximación para el oscilador armónico usando el método de Green Monte Carlo usando 6 puntos aleatorios y los puntos extremos.	80
Figura 20. Función de onda para el estado fundamental del oscilador armónico simple calculada usando el Método Green Monte Carlo, considerando 50 puntos entre -2.2 u.a. y 2.2 u.a.	81
Figura 21. Función de onda para el estado fundamental del oscilador armónico simple calculada usando el Método Green Monte Carlo considerando 1000 puntos aleatorios entre -2.2 u.a. y 2.2 u.a..	82
Figura 22. Cuadrado de la función de onda del estado fundamental del átomo de Hidrógeno en primera aproximación, usando el método de Green Monte Carlo para 7 puntos aleatorios con los puntos extremos fijos.	85
Figura 23. Cuadrado de la función de onda del estado fundamental del átomo de Hidrógeno en segunda aproximación, usando el método de Green Monte Carlo para 7 puntos aleatorios con los puntos extremos fijos.	87
Figura 24. Primera, segunda, tercera y cuarta aproximación de la función de onda para el estado fundamental del átomo de hidrógeno calculada usando el Método Green Monte Carlo, considerando 50 puntos entre 0 y 6 u.a.	88

Figura 25. Resultado obtenido para $R(x)$ en el átomo de Hidrógeno usando 1000 puntos. La figura insertada muestra la función analítica exacta para $R(r)$ y $rR(r)$. b) Resultado obtenido para $xR(x)$ en el átomo de Hidrógeno. Las curvas calculadas mostradas en a) y b) son muy similares a las funciones analíticas equivalentes mostradas en la figura insertada en a).	89
Figura 26. Cuadrado de la función de onda del estado fundamental para el potencial de Airy en primera aproximación, usando el método de Green Monte Carlo para 7 puntos aleatorios con los puntos extremos fijos.	91
Figura 27. Cuadrado de la función de onda del estado fundamental para el potencial de Airy en segunda aproximación, usando el método de Green Monte Carlo para 7 puntos aleatorios con los puntos extremos fijos.	93
Figura 28. Función de onda para el estado fundamental de una partícula en el Potencial de Airy calculada usando el Método Green Monte Carlo, considerando 50 puntos entre 0 y 15 u.a.	94
Figura 29. Resultado obtenido para el estado fundamental $\phi(x)$ de una partícula en el potencial de Airy considerando 500 puntos. La figura insertada muestra el resultado obtenido para $\phi(x)$ obtenido de Gilbert-1991	95

Introducción

En la solución de los problemas relacionados con la ecuación de Schrödinger se usan varios métodos aproximados porque no es posible obtener soluciones analíticas en la mayoría de los casos. Esta tesis trata sobre la implementación de un método aproximado basado en las funciones de Green el cual permite obtener información del estado fundamental del sistema estudiado. Los problemas que se abordan son problemas sencillos: el problema del pozo infinito en 1-D, el oscilador armónico en 1-D, el átomo de Hidrógeno y el de una partícula en el potencial de Airy en 1-D. Los resultados obtenidos están en concordancia con la solución analítica.

El aporte de la Función de Green es significativo pues numéricamente es de fácil y rápida implementación. Los resultados muestran que el método de la Función de Green es rápido, y muy eficiente. Asimismo la implementación del método Green-Monte Carlo permite una mejor estimación de las integrales involucradas lo que lleva a mejorar los resultados.

Capítulo I. La Función de Green y el Método Monte Carlo

En este capítulo se revisan las principales ideas de la función de Green Valqui 1996 y el Método Monte Carlo Binder y col. 2012. También se muestra su aplicación al problema de una partícula en un pozo infinito en una dimensión, el problema del oscilador armónico en una dimensión, la solución de la parte radial del átomo de Hidrógeno y el problema de una partícula en el potencial de Airy. Este método se aplicará para encontrar la energía y la función de onda del estado fundamental de cada uno de estos problemas.

El método puede generalizarse para otros problemas similares.

1.1. Función de Green

Sea la ecuación diferencial

$$AD^2u + BDu + Cu = H \quad (1.1)$$

siendo \mathcal{D} el operador de derivación y $A = A(x)$, $B = B(x)$, $C = C(x)$, $H = H(x)$, funciones definidas en el intervalo $[a, b]$, de tal manera que $A = A(x)$ no se anule en ningún punto del mismo.

Asimismo de la función $\mathcal{T} = \exp\left(\int \frac{B}{A} dx\right)$,

$$\mathcal{D}\mathcal{T} = \frac{B}{A}\mathcal{T} \quad (1.2)$$

multiplicando la ecuación 1.1 por la función $\frac{\mathcal{T}}{A}$ y reemplazando 1.2, obtenemos:

$$\mathcal{T}\mathcal{D}^2u + \mathcal{D}\mathcal{T}\mathcal{D}u + \frac{\mathcal{T}C}{A}u = \frac{\mathcal{T}H}{A} \quad (1.3)$$

Llamemos

$$\frac{\mathcal{T}C}{A} = q, \quad F = \frac{\mathcal{T}H}{A} \quad (1.4)$$

con lo que la ecuación 1.3 se puede escribir como:

$$\mathcal{T}\mathcal{D}^2u + \mathcal{D}\mathcal{T}\mathcal{D}u + qu = F$$

ó

$$(\mathcal{D}(\mathcal{T}\mathcal{D}) + q)u = F$$

Si $\mathcal{L} = \mathcal{D}(\mathcal{T}\mathcal{D}) + q$,

$$\mathcal{L}u = F \quad (1.5)$$

Sean $G(x, h)$ y $\rho(x, h)$ funciones definidas en el intervalo $[a, b]$, donde “ h ” está en el intervalo $[a, b]$. A la función $G(x, h)$ se le denomina función de Green cuyas propiedades se irán construyendo a fin de que nos permita obtener una solución de la ecuación 1.5. $G(x, h)$ y $\rho(x, h)$ son tales que,

$$\rho(x, h) = \mathcal{T}(x)[G(x, h)(\mathcal{D}u(x)) - u(x)(\mathcal{D}G(x, h))] \quad (1.6)$$

Realizando ciertas operaciones (Anexo 1), se tiene:

$$\mathcal{D}\rho = \mathcal{D}[(\mathcal{T}G)(\mathcal{D}u) - (\mathcal{T}u)(\mathcal{D}G)] \quad (1.7)$$

es decir que,

$$\mathcal{D}\rho = G\mathcal{L}u - u\mathcal{L}G \quad (1.8)$$

usando la ecuación 1.5 se tiene que,

$$\mathcal{D}\rho = GF - u\mathcal{L}G \quad (1.9)$$

Buscamos $G(x, h)$ tal que,

$$\mathcal{L}G(x, h) = 0 \quad (1.10)$$

luego: $\mathcal{D}\rho = GF$, es decir $\frac{d\rho}{dx} = GF$, de donde

$$\int d\rho(x, h) = \int F(x)G(x, h)dx \quad (1.11)$$

Definimos las funciones $G_1(x, h)$ y $G_2(x, h)$, tales que

$$G(x, h) = \begin{cases} G_1(x, h) & \text{si } a \leq x < h \\ G_2(x, h) & \text{si } h < x \leq b \end{cases}$$

La ecuación 1.11 define $\rho_1(x, h)$ y $\rho_2(x, h)$ en los intervalos $[a, h)$ y $(h, b]$ de acuerdo a ($\varepsilon \rightarrow 0$),

$$\begin{aligned} \int_a^{h-\varepsilon} d\rho_1(x, h) &= \int_a^{h-\varepsilon} F(x)G_1(x, h)dx \\ \int_{h+\varepsilon}^b d\rho_2(x, h) &= \int_{h+\varepsilon}^b F(x)G_2(x, h)dx \end{aligned}$$

Si $h^- = h - \varepsilon$ y $h^+ = h + \varepsilon$,

$$\rho_1(h^-, h) - \rho_1(a, h) = \int_a^{h^-} F(x)G_1(x, h)dx \quad (1.12)$$

$$\rho_2(b, h) - \rho_2(h^+, h) = \int_{h^+}^b F(x)G_2(x, h)dx \quad (1.13)$$

De la suma de estas dos últimas ecuaciones se tiene,

$$Q(h) = R(h) + \int_a^{h^-} F(x)G_1(x, h)dx + \int_{h^+}^b F(x)G_2(x, h)dx$$

donde, $Q(h) = \rho_1(h^-, h) - \rho_2(h^+, h)$ y $R(h) = \rho_1(a, h) - \rho_2(b, h)$

De la ecuación 1.6,

$$\rho_1(h^-, h) = \mathcal{T}(h)[G_1(h^-, h)(\mathcal{D}u(h)) - u(h)(\mathcal{D}G_1(h^-, h))] \quad (1.14)$$

y

$$\rho_2(h^+, h) = \mathcal{T}(h)[G_2(h^+, h)(\mathcal{D}u(h)) - u(h)(\mathcal{D}G_2(h^+, h))] \quad (1.15)$$

De (1.14) y (1.15) en (1.13):

$$\begin{aligned} \rho_1(h^-, h) - \rho_2(h^+, h) &= \mathcal{T}(h)[G_1(h^-, h) - G_2(h^+, h)]u'(h) + \mathcal{T}(h)[G_2'(h^+, h) - G_1'(h^-, h)]u(h) \\ &= \rho_1(a, h) - \rho_2(b, h) + \int_a^b G(x, h)F(x)dx \end{aligned} \quad (1.16)$$

Para hallar $u(x)$ exigimos que $G(x, h)$ cumpla las siguientes condiciones,

$$\begin{aligned} G_1(h^-, h) &= G_2(h^+, h) \\ G_2'(h^+, h) - G_1'(h^-, h) &= \frac{1}{\mathcal{T}(h)}, \end{aligned} \quad (1.17)$$

Es decir que en $x = h$, $G(x, h)$ debe ser continua y debe tener un salto en su derivada igual a $1/\mathcal{T}(h)$, con lo cual,

$$u(h) = \rho_1(a, h) - \rho_2(b, h) + \int_a^b G(x, h)F(x)dx \quad (1.18)$$

Si además $\rho_1(a, h) = 0$ y $\rho_2(b, h) = 0$ (lo cual se cumple si $u(a) = G_1(a, h) = 0$ y $u(b) = G_2(b, h) = 0$, entonces se tiene $u(x)$ como una solución integral (la variable h esta definida en el mismo rango que x):

$$u(h) = \int_a^b G(x, h)F(x)dx \quad (1.19)$$

Si en esta ecuación tomamos una función de prueba en vez de $F(x)$ entonces 1.19 sirve para construir una solución aproximada de la ecuación diferencial inicial.

1.2. El Método Monte Carlo

Es un método numérico aproximado que usa números aleatorios para simular un problema y encontrar información de interes como por ejemplo el cálculo de integrales Chen y Anderson 1995 Carol A. Traynor y Boghosian 1991.

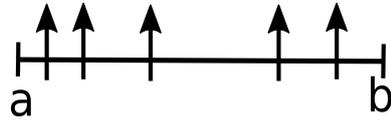
Para evaluar estas integrales no se considera un arreglo previamente definido de puntos sino que se toma un arreglo aleatorio. Este método puede usarse para evaluar la integral 1.19 y construir la solución de una ecuación diferencial.

En el cálculo de una integral usando el método Monte Carlo la Integral es la suma de los valores de la función $f(x_{random,i})$ en los valores escogidos al azar $x_{random,i}$ multiplicados por el intervalo de integración $(b-a)$ y dividido por el número de puntos generados. Al escoger puntos del intervalo escogidos al azar, el método no está condicionado por lo que la evaluación de la integral es más representativo y es de fácil implementación.

En este trabajo se aplica el método Monte Carlo al cálculo de las ecuaciones integrales que aparecen en las soluciones de los problemas sencillos de resolver la Ecuación de Schrödinger para el estado fundamental del pozo infinito, el oscilador armónico, el átomo de Hidrógeno y el potencial

de Airy usando el método de Green.

Figura 1: Representación por flechas verticales de cinco valores de números aleatorios escogidos en el intervalo (a,b) .



Capítulo II. Aspecto Teórico

En esta parte se describe la solución analítica y la solución integral usando el método de Green de cuatro problemas sencillos de la mecánica cuántica:

- I) Una partícula en un pozo infinito unidimensional.
- II) Oscilador armónico simple en una dimensión.
- III) Ecuación radial del átomo de Hidrógeno.
- IV) Partícula en el potencial de Airy.

2.1. Partícula en un pozo infinito unidimensional

Decimos que una partícula de masa m está en un pozo infinito unidimensional si está sometida a un potencial de la forma Cohen-Tannoudji, Diu y Laloë 1977 ,

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

La ecuación de onda de Schrödinger para el estado estacionario es:

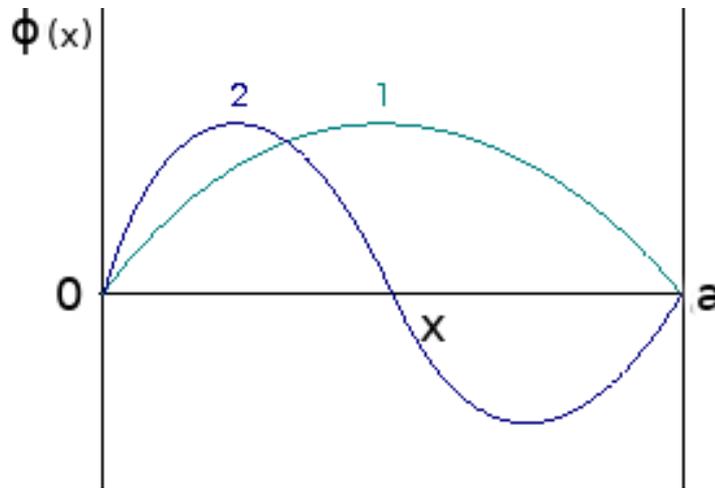
$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\phi = 0$$

Si $V(x) = 0$ (partícula libre), para $0 \leq x \leq a$:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\phi = 0 \tag{2.1}$$

llamamos $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$, con lo que la ecuación 2.1 se convierte en:

Figura 2: Función de onda del estado fundamental (1) y del primer estado excitado (2) para el problema de una partícula en un pozo de potencial infinito.



$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + k^2\phi = 0 \quad (2.2)$$

resolviendo la ecuación 2.2 se tiene:

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad 0 \leq x \leq a$$

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

Para el estado fundamental $n = 1$.

$$\phi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen}\left(\frac{\pi x}{a}\right) \quad (2.3)$$

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad (2.4)$$

La figura 2 muestra la función de onda para el estado fundamental de una partícula en un pozo de potencial infinito unidimensional de ancho a .

En unidades atómicas (u.a.) como se indica en el Anexo 2,

$$m = e = \hbar = 4\pi\epsilon_0 = 1,$$

por lo que:

$$E_1 = \frac{\pi^2}{2a^2}$$

Si además $a = 2$ u.a.,

$$E_1 = 1,23370632 \text{ u.a.} \quad (2.5)$$

o en eV, $E_1 = 33,57 \text{ eV}$

2.1.1. Función de Green para el Pozo Infinito Unidimensional

Escribimos la ecuación 2.2 como:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = H(x) \quad (2.6)$$

donde $H(x) = -k^2\phi(x)$. De la ecuación 1.1, para la ecuación 2.6, $A = A(x) = 1$; $B = B(x) = 0$;

$C = C(x) = 0$.

Para $\mathcal{T}(x)$ se tiene,

$\mathcal{T}(x) = \exp\left(\int \frac{B}{A} dx'\right) = 1$. De la ecuación 1.4, $q = 0$, con lo que la ecuación 1.10 se escribe como,

$$\mathcal{D}^2 G = 0 \quad (2.7)$$

Resolvemos esta ecuación dividiendo el intervalo $[0, a]$, donde a , es el ancho del pozo, en dos intervalos: $[0, h] > y < h, a]$ y buscamos las soluciones $G_1(x, h)$ y $G_2(x, h)$ para estos intervalos, como

$$G(x, h) = \begin{cases} G_1(x, h) = A_1x + B_1 & \text{si } 0 \leq x < h \\ G_2(x, h) = -A_2x + B_2 & h < x \leq a \end{cases} \quad (2.8)$$

las condiciones de contorno son: $\phi(0) = \phi(a) = 0$

Exigimos que la función de Green cumpla las mismas condiciones de contorno que la función de onda por lo que,

$$G(x, h) = \begin{cases} G_1(x, h) = A_1x & 0 \leq x < h \\ G_2(x, h) = A_2(-x + a) & h < x \leq a \end{cases} \quad (2.9)$$

$$G'(x, h) = \begin{cases} G'_1(x, h) = A_1 & 0 \leq x < h \\ G'_2(x, h) = -A_2 & h < x \leq a \end{cases} \quad (2.10)$$

de las condiciones para $x = h$, dadas en la ecuación 1.17,

$$A_1 = \frac{A_2(-h + a)}{h}; A_2 = \frac{-h}{a}, \text{ con lo que } A_1 = \frac{h - a}{a}$$

Reemplazando en la ecuación 2.9,

$$G(x, h) = \begin{cases} G_1(x, h) = \frac{(h - a)x}{a} & 0 \leq x < h \\ G_2(x, h) = \frac{(x - a)h}{a} & h < x \leq a \end{cases} \quad (2.11)$$

Esta es la función de Green que usaremos para resolver numéricamente el problema del pozo infinito.

La solución de la ecuación diferencial viene dada por 1.18 donde resta verificar que $\rho_1(a, h) = 0$ y $\rho_2(b, h) = 0$ para el pozo infinito.

Sea $\phi(x) = u(x)$

$$\rho(x, h) = \mathcal{T}(x)[G(x, h)\mathcal{D}\phi(x) - \phi(x)\mathcal{D}G(x, h)]$$

Para $x = 0$,

$$\rho_1(0, h) = \mathcal{T}(0)[G_1(0, h)\mathcal{D}\phi(0) - \phi(0)\mathcal{D}G_1(0, h)]$$

De las condiciones de contorno, $\phi(0) = G_1(0, h) = 0$ por lo que

$$\rho_1(0, h) = 0$$

Para $x = a$,

$$\rho_2(a, h) = \mathcal{T}(a)[G_2(a, h)\mathcal{D}\phi(a) - \phi(a)\mathcal{D}G_2(a, h)]$$

De las condiciones de contorno, $\phi(a) = G_2(a, h) = 0$, por lo que

$$\rho_2(a, h) = 0$$

Luego la solución viene dada por,

$$\phi(h) = \int G(x, h)F(x)dx$$

2.2. El Oscilador Armónico Simple en una dimensión

Se definirán y explicarán los conceptos básicos del oscilador armónico unidimensional encontrando los valores de la energía y la función de onda en el estado fundamental Butkov 1971.

La ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico en una dimensión es,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\phi = E\phi$$

con $\omega^2 = k/m$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \phi = E\phi \quad (2.12)$$

consideremos la constante μ y la variable "y" definida como,

$$y = \mu x \longrightarrow dx^2 = \frac{1}{\mu^2} dy^2 \quad (2.13)$$

sustituyendo 2.13 en 2.12

$$-\frac{\hbar^2 \mu^2}{2m} \frac{d^2\phi(y)}{dy^2} + \frac{m\omega^2 y^2}{2\mu^2} \phi(y) = E\phi(y) \quad (2.14)$$

hacemos:

$$\frac{\hbar^2 \mu^2}{2m} = \frac{m\omega^2}{2\mu^2}$$

de donde

$$\mu^2 = \frac{m\omega}{\hbar} \quad (2.15)$$

luego 2.14 se convierte en:

$$\frac{d^2\phi}{dy^2} - y^2\phi = -\frac{2E}{\hbar\omega}\phi$$

llamamos:

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (2.16)$$

luego: $\frac{d^2\phi}{dy^2} - y^2\phi = -\lambda\phi$

$$\frac{d^2\phi}{dy^2} + (\lambda - y^2)\phi = 0 \quad (2.17)$$

Estudiando la función de onda en el infinito, cuando $y \rightarrow \infty$ La ecuación 2.17 se convierte en

$$\frac{d^2\phi}{dy^2} - y^2(\phi)_\infty = 0$$

Operando,

$$\frac{d}{dy} \left(\frac{d\phi}{dy} \right)_\infty - \frac{d}{dy} \left(y^2 \phi^2 \right)_\infty = 0 \quad (2.18)$$

Resolviendo:

$$\phi(y \rightarrow \infty) \propto e^{-y^2/2}$$

Tomaremos para otros valores de y ,

$$\phi(y) = \Omega(y)e^{-y^2/2} \quad (2.19)$$

Reemplazando 2.19 en 2.17 y operando se tiene,

$$\frac{d^2\Omega}{dy^2} - 2y \frac{d\Omega}{dy} + (\lambda - 1)\Omega = 0 \quad (2.20)$$

Usando series de Frobenius para Ω se encuentra la solución de 2.20:

$$\Omega(y) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n y^n$$

con,

$$a_{n+2} = \frac{(2n - (\lambda - 1))a_n}{(n + 1)(n + 2)} \quad n = 0, 1, 2, 3 \dots$$

Esta serie no converge por lo que es necesario truncarla. Esto es posible si,

$$2n - (\lambda - 1) = 0 \rightarrow \lambda = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, 3 \dots$$

De la ecuación 2.16,

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\omega \text{ (u.a.)} \quad n = 0, 1, 2, 3 \dots$$

La función de onda para el n-ésimo estado es:

$$\phi_n(y) = (2^n n! \sqrt{\pi})^{-1/2} (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2/2}, \quad n = 0, 1, 2, 3 \dots$$

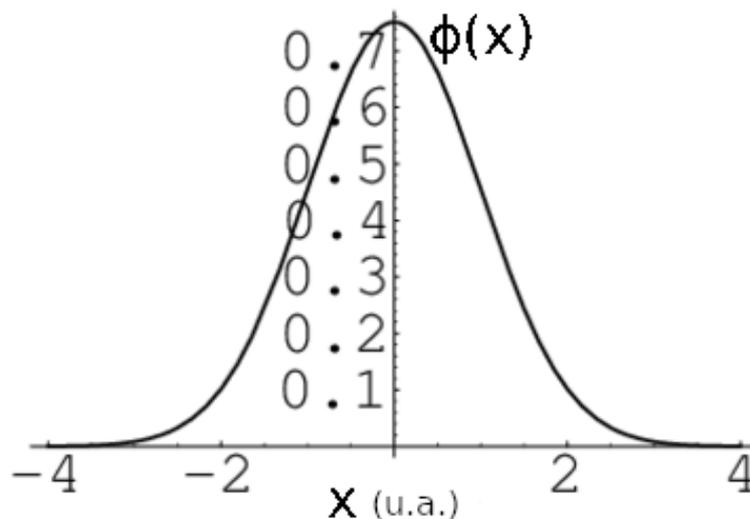
La función de onda para el estado fundamental es,

$$\phi_0(y) = (\sqrt{\pi})^{-1/2} e^{-y^2/2}, \quad -\infty < y < \infty$$

En términos de x :

$$\phi_0(x) = (\sqrt{\pi})^{-1/2} e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2}, \quad -\infty < x < \infty$$

Figura 3: Gráfico de la Función de onda del estado fundamental del oscilador armónico simple.



La figura 3 muestra la función de onda para el estado fundamental del oscilador armónico simple.

2.2.1. Función de Green para el Oscilador Armónico Simple

Escribimos la ecuación 2.17 como:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = H(x) \quad (2.21)$$

donde $H(x) = (x^2 - \lambda)\phi(x)$. Consideraremos además una región de trabajo para el oscilador de ancho $2a$, es decir que x toma valores entre $-a$ y a .

Análogamente al caso del Pozo infinito se tiene de la ecuación 1.1,

$$A = A(x) = 1; B = B(x) = 0; C = C(x) = 0, \text{ de donde } \mathcal{T}(x) = 1.$$

De la ecuación 1.4, $q = 0$ con lo que la ecuación 1.10 se escribe como,

$$\mathcal{D}^2G = 0 \quad (2.22)$$

Resolvemos esta ecuación dividiendo el intervalo $[-a, a]$ en dos intervalos: $[-a, h]$ y $[h, a]$, donde a es una cantidad muy grande y buscamos las soluciones $G_1(x, h)$ y $G_2(x, h)$ para estos intervalos.

Las condiciones de contorno son:

$$\phi(a) = \phi(-a) = 0 \text{ y } \phi'(a) = \phi'(-a) = 0$$

Exigimos que la función de Green cumpla las mismas condiciones de contorno que de la función de onda, por lo que,

$$G(x, h) = \begin{cases} G_1(x, h) = A_1(x + a) & -a \leq x < h \\ G_2(x, h) = A_2(a - x) & h < x \leq a \end{cases} \quad (2.23)$$

$$G(x, h) = \begin{cases} G_1(x, h) = \frac{A_2(a - h)(x + a)}{h + a} & -a \leq x < h \\ G_2(x, h) = A_2(a - x) & h < x \leq a \end{cases} \quad (2.24)$$

$$G'(x, h) = \begin{cases} G'_1(x, h) = \frac{A_2(a - h)}{h + a} & -a \leq x < h \\ G'_2(x, h) = -A_2 & h < x \leq a \end{cases} \quad (2.25)$$

de las condiciones para $x = h$, dadas en la ecuación 1.17,

$$A_1 = \frac{A_2(-h+a)}{h+a}.$$

De la discontinuidad de la derivada en $x = h$, $A_1 = \frac{h-a}{2a}$ y $A_2 = \frac{-(h+a)}{2a}$

Reemplazando en la ecuación 2.23,

$$G(x, h) = \begin{cases} G_1(x, h) = \frac{(h-a)(x+a)}{2a} & -a \leq x < h \\ G_2(x, h) = \frac{(h+a)(x-a)}{2a} & h < x \leq a \end{cases} \quad (2.26)$$

Esta es la función de Green que usaremos para resolver numéricamente el problema del oscilador armónico simple.

La solución de la ecuación diferencial viene dada por 1.18 donde resta verificar que $\rho_1(-a, h) = 0$, $\rho_2(a, h) = 0$ para el oscilador armónico simple.

Sea $\phi(x) = u(x)$

$$\rho(x, h) = \mathcal{T}(x)[G(x, h)\mathcal{D}\phi(x) - \phi(x)\mathcal{D}G(x, h)]$$

Para $x = -a$,

$$\rho_1(-a, h) = \mathcal{T}(0)[G_1(-a, h)\mathcal{D}\phi(-a) - \phi(-a)\mathcal{D}G_1(-a, h)]$$

De las condiciones de contorno, $\phi(-a) = G_2(-a, h) = 0$, $\phi'(-a) = G_2'(-a, h) = 0$ por lo que

$$\rho_1(-a, h) = 0$$

Para $x = a$,

$$\rho_2(a, h) = \mathcal{T}(a)[G_2(a, h)\mathcal{D}\phi(a) - \phi(a)\mathcal{D}G_2(a, h)]$$

De las condiciones de contorno, $\phi(a) = G_2(a, h) = 0$, $\phi'(a) = G_2'(a, h) = 0$ por lo que

$$\rho_2(a, h) = 0$$

Luego la solución viene dada por,

$$\phi(h) = \int G(x, h)F(x)dx$$

2.3. El átomo de Hidrógeno

La ecuación de Schrödinger es:

$$H\psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi)$$

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r)\right)\psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi) \quad (2.27)$$

El operador \hat{p}^2 es Butkov 1971:

$$\hat{p}^2 = -\frac{\hbar^2}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hbar^2}{r^2} \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad (2.28)$$

Además el operador \hat{L}^2 tiene la forma,

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad (2.29)$$

De 2.28 y 2.29 se obtiene

$$\hat{p}^2 = -\frac{\hbar^2}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{r^2} \quad (2.30)$$

Aplicando el método de variables separables

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$$

Reemplazando 2.30 en 2.27,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} - \frac{C}{r} \right) R(r)Y(\theta, \phi) = ER(r)Y(\theta, \phi)$$

siendo: $V(r) = -\frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{C}{r}$

$$C = \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0}$$

C= constante eléctrica; z: Número atómico

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \left(\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} - \frac{C}{r} \right) R(r) = ER(r) \quad (2.31)$$

$$R(r) = \frac{\phi(r)}{r} \quad (2.32)$$

Reemplazando 2.32 en 2.31

$$\frac{d^2 \phi}{dr^2} - \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} - \frac{C}{r} \right) \phi(r) = -\frac{2mE_r}{\hbar^2} \phi(r) \quad (2.33)$$

Se tienen tres casos:

- I) $r \rightarrow 0, \phi \rightarrow \phi_0$
- II) $r \rightarrow \infty, \phi \rightarrow \phi_\infty$
- III) $0 < r < \infty, \phi \rightarrow \phi_F$

Analizamos cada caso por separado,

- i) $r \rightarrow 0,$

Si $r \rightarrow 0$, la ecuación 2.33 se convierte en,

$$\frac{d^2 \phi_0}{dr^2} - \left(\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) \phi_0(r) = 0 \quad (2.34)$$

Si $\phi_0 = Cr^k$, se tiene que $k = -\ell; k = \ell + 1$, luego

$$\phi_0 = C_1 r^{-\ell} + C_2 r^{\ell+1} \quad (2.35)$$

Luego cuando $r \rightarrow 0$,

$$\phi_0 = C_2 r^{\ell+1} \quad (2.36)$$

ii) $r \rightarrow \infty$,

Si $r \rightarrow \infty$, la ecuación 2.33 se convierte en,

$$\frac{d^2 \phi_\infty}{dr^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \phi_\infty \quad (2.37)$$

Llamamos $\alpha^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$, con lo que

$$\frac{d^2 \phi_\infty}{dr^2} = \alpha^2 \phi_\infty \quad (2.38)$$

La solución general de esta ecuación es:

$$\phi_\infty = Ae^{\alpha r} + Be^{-\alpha r} \quad (2.39)$$

Para que la densidad de probabilidad este acotada, $A = 0$

Como la solución debe anularse para $r \rightarrow \infty$,

$$\phi_\infty = Be^{-\alpha r} \quad (2.40)$$

iii) $0 < r < \infty$,

Asumimos que la solución es de la forma $\phi(r) = \phi_0(r)\phi_F(r)\phi_\infty(r)$

Es decir,

$$\phi(r) = r^{\ell+1} \phi_F e^{-\alpha r} \quad (2.41)$$

Reemplazando en la ecuación 2.33 se tiene,

$$\frac{d^2 \phi_F}{dr^2} + 2\left(\frac{\ell+1}{r} - \alpha\right) \frac{d\phi_F}{dr} + \left(\frac{2mze^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} - 2\alpha(\ell+1)\right) \frac{\phi_F}{r} = 0 \quad (2.42)$$

donde $0 < r < \infty$

Usando serie de potencias,

$$\phi_F(r) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k r^{k+s}$$

Se tiene que la siguiente relación de recurrencia,:

$$a_{k+1} = \frac{2\alpha(k+\ell+1) - \frac{2mze^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}}{(k+1)(k+2\ell+2)} a_k$$

de donde $\alpha = \frac{mze^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n}$, donde $n \in N$ por lo que $\alpha^2 = \left(\frac{mze^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n}\right)^2$ de donde

$$E = -\frac{\alpha^2 \hbar^2}{2m}$$

En unidades atómicas, $m = \hbar = e = 4\pi\epsilon_0 = 1$ se tiene que para el estado fundamental, $\ell = s = 0; n = 1$,

$$E = -\frac{1}{2} u.a.$$

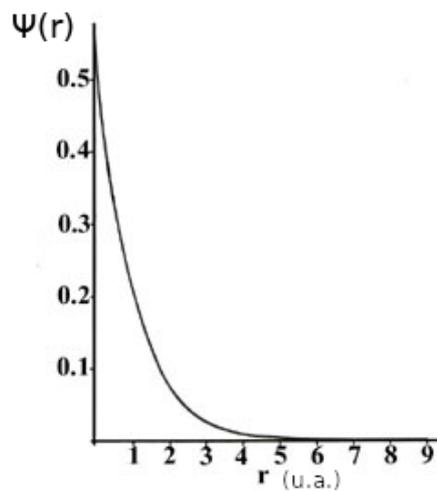
De la ecuación 2.33, $\lambda = -\frac{2mE}{\hbar^2}$, por lo que para el estado fundamental, $\lambda = 1$

La siguiente ecuación muestra la solución normalizada de la función de onda del estado fundamental para el átomo de Hidrógeno.

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{zr}{a_0}} \quad (2.43)$$

En esta ecuación, z es el número atómico, a_0 es el radio de Bohr ($z = 1$ para el átomo de Hidrógeno).

Figura 4: Gráfico de la parte radial de la Función de onda del estado fundamental del átomo de Hidrógeno.



La figura 4 muestra la función de onda para el estado fundamental del átomo de Hidrógeno.

2.3.1. Función de Green para el átomo de Hidrógeno

Escribimos la ecuación 2.33 como:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = H(x) \quad (2.44)$$

donde $H(x) = \left(-\frac{2}{x} + \lambda\right)\phi(x)$. Consideraremos que x toma valores en $[0, a)$.

Análogamente al caso del Pozo infinito se tiene de la ecuación 1.1,

$A = A(x) = 1$; $B = B(x) = 0$; $C = C(x) = 0$, de donde $\mathcal{T}(x) = 1$.

Para $\mathcal{T}(x)$ se tiene,

$\mathcal{T}(x) = \exp\left(\int \frac{B}{A} dx'\right) = 1$ De la ecuación 1.4, $q = 0$, con lo que la ecuación 1.10 se escribe como,

$$\mathcal{D}^2 G = 0 \quad (2.45)$$

Trataremos el problema de forma similar al caso del pozo infinito.

Resolvemos esta ecuación dividiendo el intervalo $[0, a]$ en dos intervalos: $[0, h)$ y $(h, a]$ y buscamos las soluciones $G_1(x, h)$ y $G_2(x, h)$ para estos intervalos, como:

$$G(x, h) = \begin{cases} G_1(x, h) = A_1 x + B_1 & 0 \leq x < h \\ G_2(x, h) = -A_2 x + B_2 & h < x \leq a \end{cases} \quad (2.46)$$

las condiciones de contorno son:

$$\phi(x=0) = \phi(x=a) = 0$$

Exigimos que la función de Green cumpla las mismas condiciones de contorno que la función de onda por lo que eso se cumple solo si,

$$G(x, h) = \begin{cases} G_1(x, h) = A_1 x & 0 \leq x < h \\ G_2(x, h) = A_2(-x + a) & h < x \leq a \end{cases} \quad (2.47)$$

$$G'(x, h) = \begin{cases} G'_1(x, h) = A_1 & 0 \leq x < h \\ G'_2(x, h) = -A_2 & h < x \leq a \end{cases} \quad (2.48)$$

de las condiciones para $x = h$, dadas en la ecuación 1.17,

$$A_1 = \frac{A_2(-h + a)}{h}; A_2 = \frac{-h}{a}, \text{ con lo que } A_1 = \frac{h - a}{a}$$

Reemplazando en la ecuación 2.47,

$$G(x, h) = \begin{cases} G_1(x, h) = \frac{(h-a)x}{a} & 0 \leq x < h \\ G_2(x, h) = \frac{(x-a)h}{a} & h < x \leq a \end{cases} \quad (2.49)$$

Esta es la función de Green que usaremos para resolver numéricamente el problema del átomo de Hidrógeno.

La solución de la ecuación diferencial viene dada por 1.18 donde resta verificar que $\rho_1(a, h) = 0$, $\rho_2(b, h) = 0$ para el átomo de Hidrógeno.

Sea $\phi(x) = u(x)$

$$\rho(x, h) = \mathcal{T}(x)[G(x, h)\mathcal{D}\phi(x) - \phi(x)\mathcal{D}G(x, h)]$$

Para $x = 0$,

$$\rho_1(0, h) = \mathcal{T}(0)[G_1(0, h)\mathcal{D}\phi(0) - \phi(0)\mathcal{D}G_1(0, h)]$$

De las condiciones de contorno, $\phi(0) = G_1(0, h) = 0$ por lo que

$$\rho_1(0, h) = 0$$

Para $x = a$,

$$\rho_2(a, h) = \mathcal{T}(a)[G_2(a, h)\mathcal{D}\phi(a) - \phi(a)\mathcal{D}G_2(a, h)]$$

De las condiciones de contorno, $\phi(a) = G_2(a, h) = 0$, por lo que

$$\rho_2(a, h) = 0$$

Luego la solución viene dada por,

$$\phi(h) = \int G(x, h)F(x)dx$$

2.4. El Potencial de Airy

Buscamos el estado fundamental de una partícula que se desplaza en una región donde actúa el potencial de Airy $V(x)$ definido por,

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{si } x < 0 \\ \alpha x & \text{si } x \geq 0, \end{cases} \quad \alpha = \text{cte.}$$

La ecuación de Schrödinger estacionaria para una partícula de masa m que se mueve en una región donde actúa el potencial de Airy es,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \alpha x\phi(x) = E\phi(x), \quad 0 < x < \infty \quad (2.50)$$

Si $\beta^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$ y considerando unidades atómicas (Anexo 2): $m = \hbar = e = 1$,

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} - (2\alpha x + \beta^2)\phi(x) = 0 \quad (2.51)$$

para $x \rightarrow \infty$, podemos escribir la ecuación anterior como,

$$\left(\frac{d\phi_\infty}{dx}\right)^2 = 2\alpha x\phi^2$$

de donde,

$$\phi_\infty(x) = Ae^{2/3\sqrt{2\alpha}x^{3/2}} + Be^{-2/3\sqrt{2\alpha}x^{3/2}}$$

Si $\sigma = \frac{2}{3}\sqrt{2\alpha}$, tenemos la solución con significado físico,

$$\phi(x) = Ae^{-\sigma x^{3/2}}$$

2.4.1. Función de Green para el potencial de Airy

Escribimos la ecuación 2.51 como:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = H(x) \quad (2.52)$$

donde $H(x) = (px + q)\phi(x)$, p y q son constantes.

Consideraremos además que x toma valores entre $\langle 0, a \rangle$

Análogamente al caso del Pozo infinito se tiene de la ecuación 1.1,

$A = A(x) = 1$; $B = B(x) = 0$; $C = C(x) = 0$, de donde $\mathcal{T}(x) = 1$.

resolvemos la ecuación 2.50 dividiendo el intervalo de trabajo $[0, a]$ en dos intervalos: $[0, h]$ y $\langle h, a \rangle$ y encontramos que,

$$G(x, h) = \begin{cases} G_1(x, h) = \frac{(h-a)x}{a} & 0 \leq x < h \\ G_2(x, h) = \frac{(x-a)h}{a} & h < x \leq a \end{cases} \quad (2.53)$$

Esta es la función de Green que usaremos para resolver numéricamente este problema.

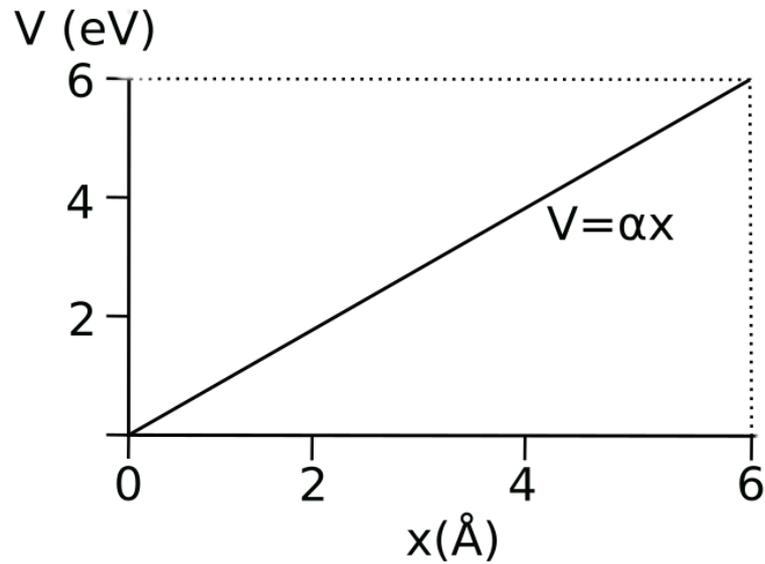
De la ecuación 2.50,

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} - \frac{2m\alpha x}{\hbar^2}\phi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\phi(x)$$

Sea $\lambda = -\frac{2mE}{\hbar^2}$. Tomando el potencial $V(x)$ como en la figura, en unidades atómicas el valor de α es 0,02.

con lo cual,

Figura 5: Potencial de Airy usado en el cálculo. Este potencial es similar al que se usa en la referencia Gilbert-1991.



$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = (0,04x + \lambda)\phi(x), \quad E = -\frac{\lambda}{2} \quad (u, a,) \quad (2.54)$$

Esta es la ecuación que resolvemos usando el método de Green.

La solución de la ecuación diferencial viene dada por 1.18 donde resta verificar que $\rho_1(a, h) = 0$, $\rho_2(b, h) = 0$ para el potencial de Airy.

Sea $\phi(x) = u(x)$

$$\rho(x, h) = \mathcal{T}(x)[G(x, h)\mathcal{D}\phi(x) - \phi(x)\mathcal{D}G(x, h)]$$

Para $x = 0$,

$$\rho_1(0, h) = \mathcal{T}(0)[G_1(0, h)\mathcal{D}\phi(0) - \phi(0)\mathcal{D}G_1(0, h)]$$

De las condiciones de contorno, $\phi(0) = G_1(0, h) = 0$ por lo que

$$\rho_1(0, h) = 0$$

Para $x = a$,

$$\rho_2(a, h) = \mathcal{T}(a)[G_2(a, h)\mathcal{D}\phi(a) - \phi(a)\mathcal{D}G_2(a, h)]$$

De las condiciones de contorno, $\phi(a) = G_2(a, h) = 0$, por lo que

$$\rho_2(a, h) = 0$$

Luego la solución viene dada por,

$$\phi(h) = \int G(x, h)F(x)dx$$

Capítulo III. Resultados numéricos usando el método de la función de Green

3.1. Cálculo de la función de onda y la energía del estado fundamental del Pozo Infinito en una dimensión usando el método de la función de Green

3.1.1. Cálculo de la función de onda del estado fundamental y su energía en primera aproximación

La ecuación general de Schrödinger es:

$$H\phi = \lambda\phi$$

siendo “ λ ” el valor propio del operador H . Usando el método de Green y considerando el término $\lambda\phi$ como elemento adicional de la ecuación homogénea y asumiendo para este término una función de prueba $\phi^{(0)}$, la solución de esta ecuación, la cual llamamos $\phi^{(1)}$, es:

$$\phi^{(1)} = \int G(x, h)\lambda^{(0)}\phi^{(0)}dx \quad (3.1)$$

Tomamos para $\phi^{(0)}$:

$$\phi^{(0)} = 1/\lambda^{(0)}$$

donde $\lambda^{(0)}$ se encuentra a partir de la condición de normalización.

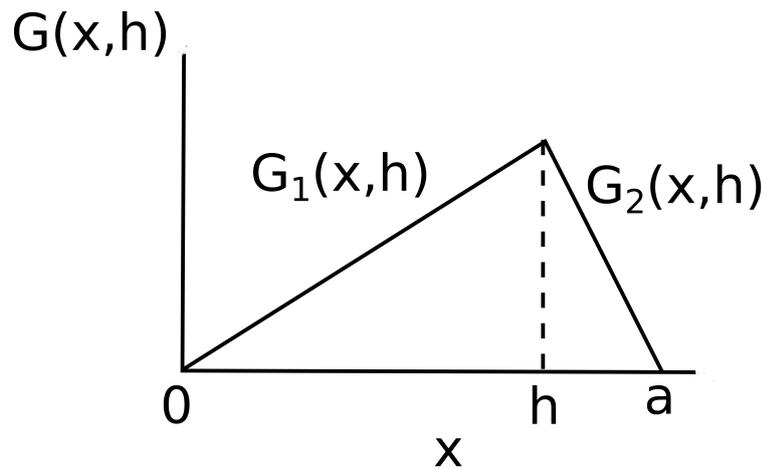
$$\mathcal{P} = \int |\phi|^2 dx = 1$$

con lo que $\phi^{(1)}$ se convierte en:

$$\phi^{(1)} = \int G(x, h) dx \quad (3.2)$$

Esta integral representa el área mostrada en la siguiente figura:

Figura 6: Gráfico de la función de Green con punto de aplicación h en el intervalo de $(0, a)$.



$$\phi^{(1)}(h) = A(\mathcal{R}) = \frac{aG(x, h)}{2} \quad (3.3)$$

Normalizamos la función de onda $\phi^{(1)}(h)$.

Si Δ es el incremento en h ,

$$N^2 = \sum_h |\phi^{(1)}(h)|^2 \Delta$$

La correspondiente función de onda normalizada es:

$$\phi_n^{(1)}(h) = \frac{\phi^{(1)}(h)}{N},$$

donde N es la constante de normalización, con lo cual se cumple que

$$\int |\phi_n^{(1)}(h)|^2 dh = 1 \quad (3.4)$$

Transformamos la integral en una sumatoria por lo que aproximadamente,

$$\sum_h |\phi_n^{(1)}(h)|^2 \Delta = 1$$

3.1.2. Cálculo del autovalor λ en primera aproximación

El valor de la energía en primera aproximación se calcula a partir de la condición de normalización de la función de onda en segunda aproximación.

El proceso que se sigue es similar al proceso seguido para hallar la función de onda en primera aproximación, es decir, partir de la ecuación de Schrödinger para el pozo infinito y considerar el término $\lambda\phi$ como $\lambda^{(1)}\phi^{(1)}$, con lo que la solución de la ecuación de Schrödinger usando el método de Green es:

$$\phi^{(2)}(h) = \int G(x, h) \lambda^{(1)} \phi_n^{(1)}(x) dx \quad (3.5)$$

Esto se puede escribir aproximadamente como:

$$\phi^{(2)}(h) = \sum_x G(x, h) \lambda^{(1)} \phi_n^{(1)}(x) \Delta = \lambda^{(1)} \sum_x G(x, h) \phi_n^{(1)}(x) \Delta \quad (3.6)$$

Para encontrar $\lambda^{(1)}$ normalizamos en todo el espacio:

$$\sum_h |\phi_n^{(2)}(h)|^2 \Delta = 1$$

$$\sum_h [\lambda^{(1)} \sum_x G(x, h) \phi_n^{(1)}(x) \Delta]^2 \Delta = 1$$

de donde,

$$\lambda^{(1)} = -\frac{1}{\sqrt{\sum_h [\sum_x G(x, h) \phi_n^{(1)}(x) \Delta]^2 \Delta}}$$

donde para $\lambda^{(1)}$ se ha tomado el signo menos por ser la solución físicamente aceptable.

Análogamente a $\phi^{(1)}$, si $\phi^{(2)}$ es la función de onda no normalizada, N es la constante de normalización y $\phi_n^{(2)}$ es la función de onda normalizada se tiene que,

$$\phi_n^{(2)}(h) = \frac{\phi^{(2)}(h)}{N},$$

con

$$N^2 = \sum_h |\phi^{(2)}(h)|^2 \Delta$$

3.1.3. Cálculo del autovalor λ para otras aproximaciones

Para encontrar λ en segunda aproximación se requiere conocer la autofunción en tercera aproximación. Para esto se sigue un proceso similar al que se siguió para obtener la función de onda en segunda aproximación

$$\phi^{(3)}(h) = \sum_x G(x, h) \lambda^{(2)} \phi_n^{(2)}(x) \Delta = \lambda^{(2)} \sum_x G(x, h) \phi_n^{(2)}(x) \Delta \quad (3.7)$$

Normalizando se encuentra $\lambda^{(2)}$,

$$\lambda^{(2)} = -\frac{1}{\sqrt{\sum_h [\sum_x G(x, h) \phi_n^{(2)}(x) \Delta]^2 \Delta}}$$

Conocido $\lambda^{(2)}$ se puede construir $\phi^{(3)}$, y normalizarlo:

$$\phi_n^{(3)}(h) = \frac{\phi^{(3)}(h)}{N},$$

con

$$N^2 = \sum_h |\phi^{(3)}(h)|^2 \Delta$$

Para $\lambda^{(j)}$ se requiere la autofunción en la aproximación $(j + 1)$ la cual se expresa en términos de su j -ésima aproximación, con lo que

$$\lambda^{(j)} = - \frac{1}{\sqrt{\sum_h [\sum_x G(x, h) \phi_n^{(j)}(x) \Delta]^2 \Delta}}$$

3.1.4. Resultados numéricos

Se aplicará la teoría propuesta de la función de Green y el método Monte Carlo para el problema de una partícula en un pozo infinito.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para este problema es:

$$\frac{d^2\phi_n(x)}{dx^2} = \lambda\phi_n(x)$$

La función de Green $G(x, h)$ correspondiente es

$$G(x, h) = \begin{cases} G_1(x, h) = \frac{(h-a)x}{a} & \text{si } 0 \leq x < h \\ G_2(x, h) = \frac{(x-a)h}{a} & \text{si } h < x \leq a \end{cases}$$

De la ecuación 3.3, $\phi^{(1)}(x) = A(R) = \frac{a}{2}G(x, h)$.

Tomando valores de x con un paso $\Delta = 0,25$ y considerando $a = 2$,

$$\phi^{(1)}(x) = A(R) = G(x, h)$$

Tabla 1: Valores de $G(x, h)$ del pozo infinito para valores de x entre 0 y 2 con un paso de 0,25.

i	$x_i = h_i$	$G_1(x_i, h_i) = G_2(x_i, h_i)$
1	0	0
2	0,25	-0,21875
3	0,5	-0,375
4	0,75	-0,46875
5	1	-0,5
6	1,25	-0,46875
7	1,5	-0,375
8	1,75	-0,21875
9	2	0

Tabla 2: Función de onda del estado fundamental en primera aproximación del pozo infinito para valores de x entre 0 y 2 con un paso de 0,25.

x_i	$\phi^{(1)}(x_i)$	$\phi_n^{(1)}(x_i)$
0	0	0
0,25	-0,21875	-0,4236592729
0,5	-0,375	-0,72627303
0,75	-0,46875	-0,90784129
0,1	-0,5	-0,96836405
1,25	-0,46875	-0,90784129
1,5	-0,375	-0,72627303
1,75	-0,21875	-0,4236592729
2	0	0

Tabla 3: Valores de $h(j)$, $x(i)$ y $G(x, h)$ para valores de x y h entre 0 y 2.

h	x	G usado	Valor de G
0,25	0	G_1	0
	0,25	G_1	-0,21875
	0,5	G_2	-0,1875
	0,75	G_2	-0,15625
	1	G_2	-0,125
	1,25	G_2	-0,09375
	1,5	G_2	-0,0625
	1,75	G_2	-0,03125
0,5	0	G_2	0
	0	G_1	0
	0,25	G_1	-0,1875
	0,5	G_2	-0,375
	0,75	G_2	-0,3125
	1	G_2	-0,25
	1,25	G_2	-0,1875
	1,5	G_2	-0,125
0,75	1,75	G_2	-0,0625
	0	G_2	0
	0	G_1	0
	0,25	G_1	-0,15625
	0,5	G_1	-0,3125
	0,75	G_1	-0,46875
	1	G_2	-0,375
	1,25	G_2	-0,28125
1,5	G_2	-0,1875	
1,75	G_2	-0,09375	

	0	G_2	0
	0	G_1	0
	0,25	G_1	-0,125
	0,5	G_1	-0,25
	0,75	G_1	-0,375
1	1	G_2	-0,5
	1,25	G_2	-0,375
	1,5	G_2	-0,25
	1,75	G_2	-0,125
	0	G_2	0
	0	G_1	0
	0,25	G_1	-0,09375
	0,5	G_1	-0,1875
	0,75	G_1	-0,28125
1,25	1	G_1	-0,375
	1,25	G_1	-0,46875
	1,5	G_2	-0,3125
	1,75	G_2	-0,15625
	0	G_2	0
	0	G_1	0
	0,25	G_1	-0,0625
	0,5	G_1	-0,125
	0,75	G_1	-0,1875
1,5	1	G_1	-0,25
	1,25	G_1	-0,3125
	1,5	G_2	-0,375
	1,75	G_2	-0,1875
	0	G_2	0
	0	G_1	0

	0,25	G_1	-0,03125
	0,5	G_1	-0,0625
	0,75	G_1	-0,09375
	1	G_1	-0,125
	1,25	G_1	-0,15625
	1,5	G_1	-0,1875
	1,75	G_1	-0,21875
	0	G_2	0
	0	G_1	0
	0,25	G_1	0
	0,5	G_1	0
	0,75	G_1	0
2	1	G_1	0
	1,25	G_1	0
	1,5	G_1	0
	1,75	G_1	0
	0	G_1	0

La figura 7 muestra la gráfica de las tres primeras aproximaciones correspondientes a los datos de las tablas 2, 4 y 5.

En la figura 7 se observa que las funciones de onda aproximadas tienen un muy buen comportamiento desde la primera aproximación, pues guardan una forma similar a la función de onda del estado fundamental teórica. Las integrales para estos cálculos se hicieron usando el método del paralelogramo ($\text{Integral} = f(x)\Delta x$) donde los valores de x están pre-determinados. Este cálculo es el que se reemplazará por el método Monte Carlo donde los valores de x serán aleatorios.

De la condición de normalización calculamos n_i y el parámetro $\lambda^{(i)}$

Tabla 4: Función de onda $\phi^{(2)}(x_i)$ del estado fundamental en segunda aproximación y normalizada $\phi_n^{(2)}(x_i)$

x_i	$\phi^{(2)}(x_i)$	$\phi_n^{(2)}(x_i)$
0	0	0
0,25	-0,3872571743	-0,3872571743
0,5	-0,7099714861	-0,71
0,75	-0,9220408915	-0,9220408915
0,1	-0,9958041627	-1
1,25	-0,9220408915	-0,9220408915
1,5	-0,7099714861	-0,71
1,75	-0,3872571743	-0,3872571743
2	0	0

Tabla 5: Función de onda del estado fundamental en tercera aproximación del pozo infinito para valores de x entre 0 y 2 con un paso de 0,25

x_i	$\phi^{(3)}(x_i)$	$\phi_n^{(3)}(x_i)$
0	0	0
0,25	-0,3831384537	-0,3831384537
0,5	-0,7073822823	-0,7073822823
0,75	-0,923648295	-0,923648295
0,1	-1	-1
1,25	-0,923648295	-0,923648295
1,5	-0,7073822823	-0,7073822823
1,75	-0,3831384537	-0,3831384537
2	0	0

Figura 7: Gráfica de las tres primeras aproximaciones para la función de onda normalizada $\phi_n(x)$ del pozo infinito correspondientes a los datos de las tablas 2, 4 y 5.

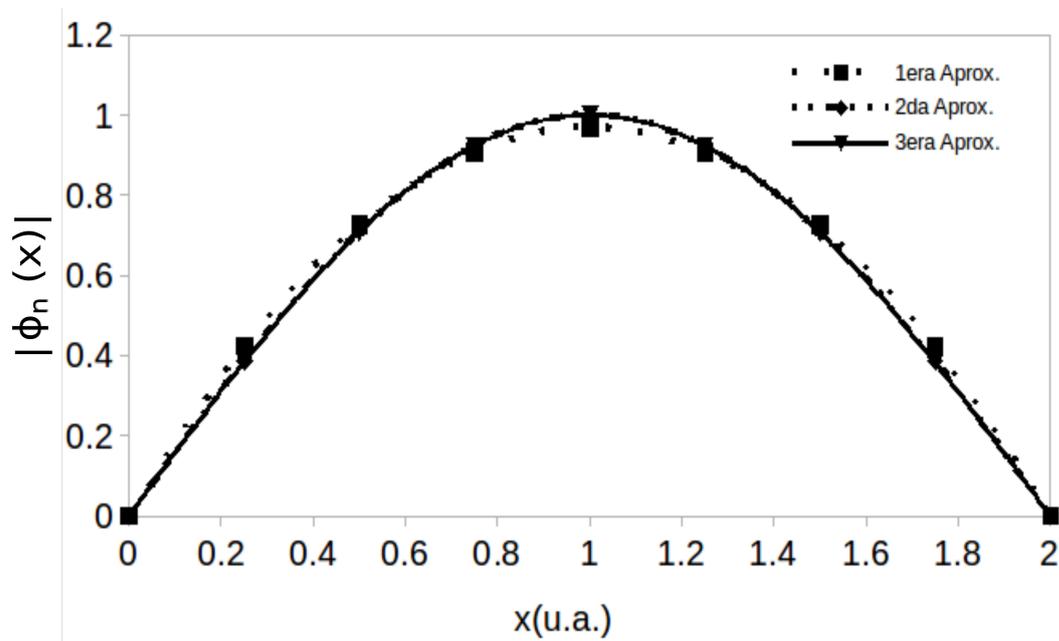


Tabla 6: Valores de n_i y $\lambda^{(i)}$ para las tres primeras iteraciones en el pozo infinito

# de iteraciones	n_i	$\lambda^{(i)}$
1	0,5163347388	-2,4375385
2	1	-2,433302888
3	1	-2,435665825

$$\phi_n^{(i)}(h_i) = \frac{\phi^{(i)}(h_i)}{n_i}$$

$$(\phi_1^2 + \phi_2^2 + \phi_3^2 + \dots + \phi_n^2)(\Delta) = n_i^2$$

de los resultados obtenidos,

$$E_1 \approx -\frac{\lambda_1^{(3)}}{2} = \frac{2,435665825}{2} = 1,22u.a.$$

3.2. Cálculo de la función de onda del estado fundamental del Oscilador Armónico y su energía usando el método de la función de Green

La ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico es:

$$\frac{d^2 \phi_n(x)}{dx^2} = (x^2 + \lambda) \phi_n(x)$$

Se aplicará la teoría propuesta de la función de Green al oscilador armónico. La función de Green es:

$$G(x, h) = \begin{cases} G_1(x, h) = \frac{(h-a)(x+a)}{2a} & \text{si } -a \leq x < h \\ G_2(x, h) = \frac{(h+a)(x-a)}{2a} & \text{si } h < x \leq a \end{cases} \quad (3.8)$$

De entre los puntos x uniformemente distribuidos con paso $\Delta = 0,5$ en el intervalo $[-a, a]$ se escoje un punto inicial $x = h$ para construir la función de onda en primera aproximación $\phi^{(1)}(x)$, la cual es,

$$\phi^{(1)}(h) = \int G(x, h)(x^2 + \lambda^{(0)})\phi^{(0)}(x)dx$$

, donde $\phi^{(0)}(x)$ es la función inicial de prueba, la cual escogemos adecuadamente. Tomamos $\phi^{(0)}(x)$ como:

$$\phi^{(0)}(x) = \frac{1}{x^2 + \lambda^{(0)}}$$

con lo que

$$\phi^{(1)}(h) = \int G(x, h)dx = A(\mathcal{R})$$

Tomando en cuenta el valor de $G(x, h)$ en $x = h$ y que $a = 2$ se observa que el área A bajo la curva de $G(x, h)$ es,

$$A = \phi^{(1)}(x = h) = 2G(x = h, h) \quad (3.9)$$

Habiendo hallado $\phi^{(1)}(x)$ podemos encontrar $\phi^{(2)}(x)$ a partir de la ecuación,

$$\phi^{(2)}(h_i) = \sum_{x_i} G(x_i, h_i)(x_i^2 + \lambda^{(1)})\phi_n^{(1)}(x_i)\Delta$$

3.2.1. Resultados numéricos

Tabla 7: Valores de $G(x, h)$ del oscilador armónico para valores de x entre -2 y 2 con un paso de 0,5

i	$x_i = h_i$	$G_1(x_i, h_i) = G_2(x_i, h_i)$
1	-1,5	-0,4375
2	-1,0	-0,75
3	-0,5	-0,9375
4	0	-1
5	0,5	-0,9375
6	1	-0,75
7	1,5	-0,4375
8	± 2	0

Tabla 8: Función de onda del estado fundamental en primera aproximación del oscilador armónico para valores de x entre -2 y 2 con un paso de 0,5

x_i	$\phi^{(1)}(h_i)$	$\phi_n^{(1)}(h_i)$
-1,5	-0,875	-0,3
-1,0	-1,5	-0,513552591
-0,5	-1,875	-0,641940738
0	-2	-0,684736788
0,5	-1,875	-0,641940738
1	-1,5	-0,513552591
1,5	-0,875	-0,3
± 2	0	0

Tabla 9: Valores de $h(j)$, $x(i)$ y $G(x, h)$ para valores de x y h entre 0 y 2

h	x	G usado	Valor de G
0	-2	G_1	0
	-1,5	G_1	-0,25
	-1	G_1	-0,5
	-0,5	G_1	-0,75
	0	G_1	-1
	0,5	G_2	-0,75
	1	G_2	-0,5
	1,5	G_2	-0,25
	2	G_2	0
0,5	-2	G_1	0
	-1,5	G_1	-0,1875
	-1	G_1	-0,375
	-0,5	G_1	-0,5625
	0	G_1	-0,75
	0,5	G_2	-0,9375
	1	G_2	-0,625
	1,5	G_2	-0,3125
	2	G_2	0
1	-2	G_1	0
	-1,5	G_1	-0,125
	-1	G_1	-0,25
	-0,5	G_1	-0,375
	0	G_1	-0,5
	0,5	G_1	-0,625
	1	G_2	-0,75
	1,5	G_2	-0,375

	2	G_2	0
	-2	G_1	0
	-1,5	G_1	-0,0625
	-1	G_1	-0,125
	-0,5	G_1	-0,1875
1,5	0	G_1	-0,25
	0,5	G_1	-0,3125
	1	G_1	-0,375
	1,5	G_2	-0,4375
	2	G_2	0

Tabla 10: Función de onda del estado fundamental en segunda aproximación del oscilador armónico para valores de x entre -2 y 2 con un paso de 0,5

x_i	$\phi^{(2)}(h_i)$	$\phi_n^{(2)}(h_i)$
-1,5	-0,1791132489	-0,179203397
-1,0	-0,4408386609	-0,441060537
-0,5	-0,6833896339	-0,683733587
0	-0,7817320193	-0,78212547
0,5	-0,6833896339	-0,683733587
1	-0,4408386609	-0,441060537
1,5	-0,1791132489	-0,179203397
± 2	0	0

Tabla 11: Función de onda del estado fundamental en tercera aproximación del oscilador armónico para valores de x entre -2 y 2 con un paso de 0,5

x_i	$\phi^{(3)}(h_i)$	$\phi_n^{(3)}(h_i)$
-1,5	-0,195285217	-0,195285217
-1,0	-0,439431838	-0,439431838
-0,5	-0,68	-0,68
0	-0,783022063	-0,783022063
0,5	-0,68	-0,68
1	-0,439431838	-0,439431838
1,5	-0,195285217	-0,195285217

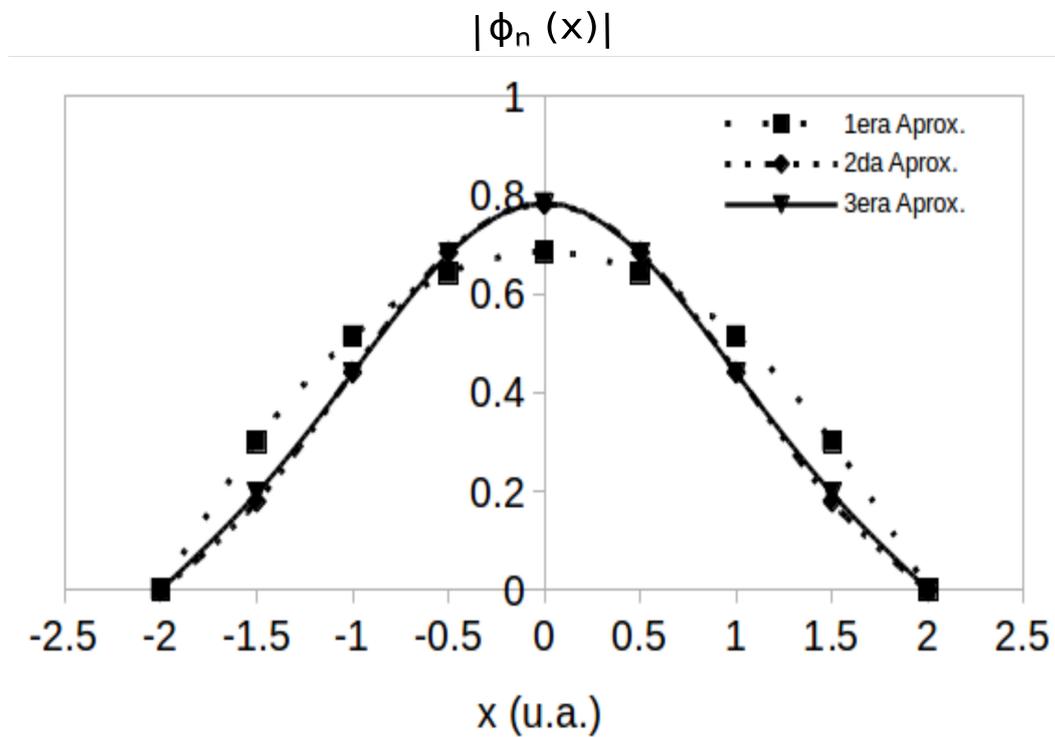
La figura 8 muestra la gráfica de las tres primeras aproximaciones correspondientes a los datos de las tablas 8, 10 y 11. En esta figura se observa que las funciones de onda aproximadas tienen un buen comportamiento recién desde la segunda aproximación, pues guardan una forma similar a la función de onda del estado fundamental teórica.

Al igual que el caso del pozo infinito, las integrales para estos cálculos se hicieron usando el método del paralelogramo el cual más adelante será reemplazado por el método Monte Carlo donde los valores de x serán aleatorios.

Tabla 12: Valores de N y $\lambda^{(i)}$ para las tres primeras iteraciones en el oscilador armónico simple

# de iteraciones	N	$\lambda^{(i)}$
1	2,920830361	-1,148859642
2	0,9994969473	-1,054190652
3	1	-1,061150967

Figura 8: Gráfica de las tres primeras aproximaciones para la función de onda normalizada $\phi_n(x)$ del oscilador armónico correspondientes a los datos de las tablas 8, 10 y 11.



De la condición de normalización calculamos N y el parámetro $\lambda^{(i)}$

$$\phi_n^{(i)}(h_i) = \frac{\phi^{(i)}(h_i)}{N}$$

$$(\phi_1^2 + \phi_2^2 + \phi_3^2 + \dots + \phi_n^2)(\Delta) = N^2$$

de los resultados obtenidos,

$$\lambda \approx \lambda^{(3)} = -1$$

y como

$$\lambda = -\frac{2E}{\hbar\omega}$$

En unidades atómicas,

$$E = \frac{1}{2}\omega$$

3.3. Cálculo de la parte radial de la función de onda del estado fundamental del átomo de Hidrógeno y su energía usando el método de la función de Green

Se aplicará la teoría propuesta de la Función de Green al átomo de Hidrógeno.

La ecuación de Schrödinger para el átomo de Hidrógeno es:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = \left(-\frac{2}{x} + \lambda\right)\phi \quad (3.10)$$

Usando el operador $\mathcal{D}^2 = \frac{d^2}{dx^2}$,

$$\mathcal{D}^2 G = 0$$

donde G es la función de Green, por lo que

$$G(x, h) = \begin{cases} G_1(x, h) = \left(\frac{h-a}{a}\right)x & \text{si } 0 \leq x < h \\ G_2(x, h) = \left(\frac{x-a}{a}\right)h & \text{si } h < x \leq a \end{cases}$$

Entonces la solución para la ecuación del átomo de Hidrógeno es:

$$\phi(h) = \int G(x, h) \left(\frac{-2}{x} + \lambda\right)\phi(x) dx \quad (3.11)$$

Esta es la llamada solución integral, la cual depende a su vez de la misma solución.

El paso siguiente es proponer una solución de prueba (solución de orden cero $\phi^{(0)}(x)$, con su correspondiente autovalor $\lambda^{(0)}$) que se pondrá dentro de la integral para hallar la solución aproximada de orden uno ($\phi^{(1)}(x)$).

Luego en primera aproximación la función de onda es:

$$\phi^{(1)} = \int G\left(-\frac{2}{x} + \lambda^{(0)}\right)\phi^{(0)} dx \quad (3.12)$$

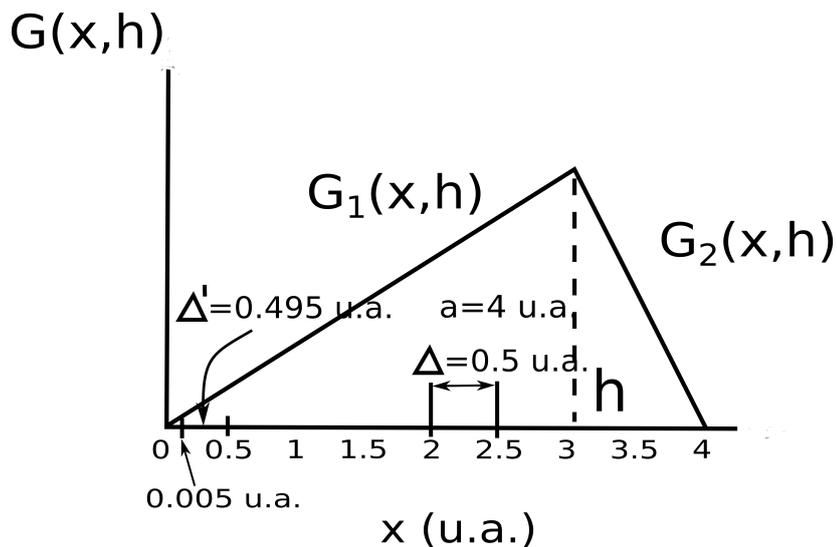
Usando la función de prueba,

$$\phi^{(0)} = \frac{1}{-\frac{2}{x} + \lambda^{(0)}}$$

Luego en 3.14 se tiene:

$$\phi^{(1)} = \int G(x, h) dx = A(\mathcal{R}) = \frac{a}{2} G(x, h) = 2G(x, h)$$

Figura 9: Representación de la Función de Green y los pasos en x usados en el cálculo para el átomo de Hidrógeno.



Para nuestro trabajo, $a = 4u.a.$ En las siguientes aproximaciones se tiene (transformando las integrales en sumatorias):

$$\phi^{(2)}(h_i) = \sum_{x_i} G(x_i, h_i) \left(-\frac{2}{x_i} + \lambda^{(1)} \right) \phi_n^{(1)}(x_i) \Delta$$

$$\phi^{(3)}(h_i) = \sum_{x_i} G(x_i, h_i) \left(-\frac{2}{x_i} + \lambda^{(2)} \right) \phi_n^{(2)}(x_i) \Delta$$

.....

En general, para la j-ésima aproximación ($j = 1, 2, 3, \dots$),

$$\phi^{(j+1)}(h_i) = \sum_{x_i} G(x_i, h_i) \left(-\frac{2}{x_i} + \lambda^{(j)} \right) \phi_n^{(j)}(x_i) \Delta$$

La función de onda normalizada correspondiente es:

$$\phi_n^{(j+1)}(h_i) = \frac{\phi^{(j+1)}(h_i)}{N}$$

siendo $N^2 = \sum_h |\phi^{(j+1)}(h_i)|^2 \Delta$

3.3.1. Resultados numéricos

Tabla 13: Valores de $G(x, h)$ del átomo de Hidrógeno para valores de x entre 0,005 y 4. El paso entre 0,5 y 4 es de 0,5.

i	$x_i = h_i$	$G_1(x_i, h_i) = G_2(x_i, h_i)$
1	0,005	-0,005
2	0,5	-0,4375
3	1	-0,75
4	1,5	-0,9375
5	2	-1
6	2,5	-0,9375
7	3	-0,75
8	3,5	-0,4375
9	4	0

Tabla 14: Función de onda del estado fundamental en primera aproximación del átomo de Hidrógeno de x entre 0,005 y 4. El paso entre 0,5 y 4 es de 0,5.

i	x_i	$\phi^{(1)}(x_i)$	$\phi_n^{(1)}(x_i)$
1	0,005	-0,0099875	-0,00341939444
2	0,5	-0,875	-0,3
3	1	-1,5	-0,5135511048
4	1,5	-1,875	-0,6419388811
5	2	-2	-0,6847348065
6	2,5	-1,875	-0,6419388811
7	3	-1,5	-0,5135511048
8	3,5	-0,875	-0,3
9	4	0	0

Tabla 15: Valores de $h(j)$, $x(i)$ y $G(x, h)$ para valores de x y h entre 0 y 2

h	x	G usado	Valor de G
	0	G_1	0
	0,005	G_1	-0,00499
	0,5	G_1	-0,004375

	1	G_1	-0,00375
	1,5	G_1	-0,003125
	2	G_2	-0,0025
	2,5	G_2	-0,001875
	3	G_2	-0,00125
	3,5	G_2	-0,000625
	4	G_2	0
<hr/>			
	0,005	G_1	-0,004375
	0,5	G_1	-0,4375
	1	G_2	-0,375
	1,5	G_2	-0,3125
0,5	2	G_2	-0,25
	2,5	G_2	-0,1875
	3	G_2	-0,125
	3,5	G_2	-0,0625
	4	G_2	0
<hr/>			
	0,005	G_1	-0,00375
	0,5	G_1	-0,375
	1	G_2	-0,75
	1,5	G_2	-0,625
1	2	G_2	-0,5
	2,5	G_2	-0,375
	3	G_2	-0,25
	3,5	G_2	-0,125
	4	G_2	0
<hr/>			
	0,005	G_1	0,003125
	0,5	G_1	-0,3125
	1	G_2	-0,625
	1,5	G_2	-0,9375

1,5

	2	G_2	-0,75
	2,5	G_2	-0,5625
	3	G_2	-0,375
	3,5	G_2	-0,1875
	4	G_2	0
	<hr/>		
	0,005	G_1	0,0025
	0,5	G_1	-0,25
	1	G_2	-0,5
	1,5	G_2	-0,75
2	2	G_2	-1
	2,5	G_2	-0,75
	3	G_2	-0,5
	3,5	G_2	-0,25
	4	G_2	0
	<hr/>		
	0,005	G_1	0,001875
	0,5	G_1	-0,1875
	1	G_2	-0,375
	1,5	G_2	-0,5625
2,5	2	G_2	-0,75
	2,5	G_2	-0,9375
	3	G_2	-0,625
	3,5	G_2	-0,3125
	4	G_2	0
	<hr/>		
	0,005	G_1	0,00125
	0,5	G_1	-0,125
	1	G_2	-0,25
	1,5	G_2	-0,375
3	2	G_2	-0,5
	2,5	G_2	-0,625

	3	G_2	-0,75
	3,5	G_2	-0,375
	4	G_2	0
	<hr/>		
	0,005	G_1	0,000625
	0,5	G_1	-0,0625
	1	G_2	-0,125
	1,5	G_2	-0,1875
3,5	2	G_2	-0,25
	2,5	G_2	-0,3125
	3	G_2	-0,375
	3,5	G_2	-0,4375
	4	G_2	0
	<hr/>		
	0,005	G_1	0
	0,5	G_1	0
	1	G_2	0
	1,5	G_2	0
4	2	G_2	0
	2,5	G_2	0
	3	G_2	0
	3,5	G_2	0
	4	G_2	0
	<hr/>		

Tabla 16: Función de onda del estado fundamental en 2da, 3era, 4ta y 5ta aproximación del átomo de Hidrógeno de x entre 0,005 y 4. El paso entre 0,5 y 4 es de 0,5.

x_i	$\phi_n^{(2)}(h_i)$	$\phi_n^{(3)}(h_i)$	$\phi_n^{(4)}(h_i)$	$\phi_n^{(5)}(h_i)$
0,005	-0,008028122463	-0,0134600995	-0,01922711896	-0,02507974709
0,5	-0,4682069006	-0,5607426873	-0,604701	-0,6254203645
1	-0,6804330851	-0,7387109754	-0,7575596047	-0,7641536017
1,5	-0,7170299839	-0,7121469472	-0,7020422549	-0,6957454236
2	-0,641063759	-0,5895608611	-0,5643392322	-0,5542141539
2,5	-0,5021119629	-0,434446386	-0,4077227999	-0,395160671
3	-0,3361862184	-0,2792284466	-0,2588914311	-0,2500604759
3,5	-0,1658221129	-0,1350810436	-0,1243763248	-0,1199964378
4	0	0	0	0

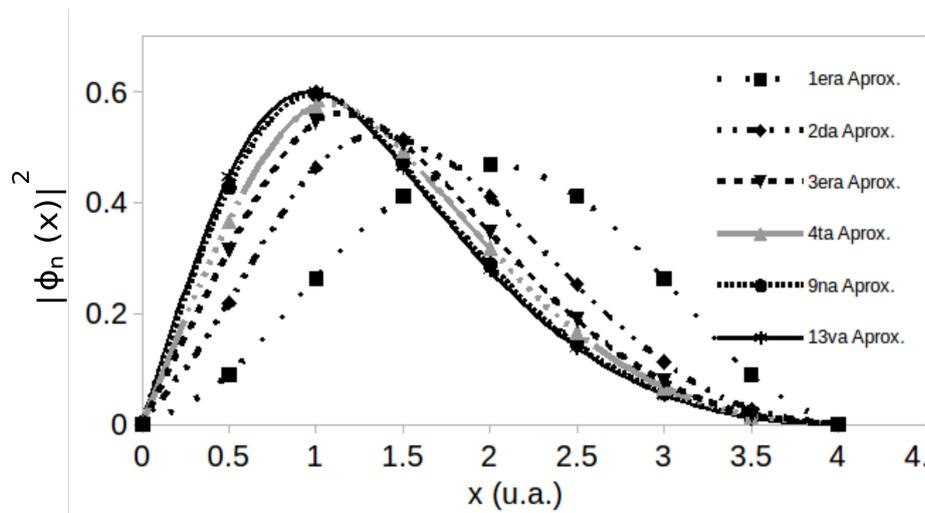
Tabla 17: Función de onda del estado fundamental en 6ta, 7ma, 8va y 9na aproximación del átomo de Hidrógeno de x entre 0,005 y 4. El paso entre 0,5 y 4 es de 0,5

x_i	$\phi_n^{(6)}(h_i)$	$\phi_n^{(7)}(h_i)$	$\phi_n^{(8)}(h_i)$	$\phi_n^{(9)}(h_i)$
0,005	-0,03092137638	-0,0367107737	-0,04243270384	-0,04808131319
0,5	-0,636651442	-0,6437434224	-0,6492096438	-0,6539633941
1	-0,7675355428	-0,7691895446	-0,7703966956	-0,7716
1,5	-0,6928043272	-0,6903726836	-0,6885837213	-0,6869289413
2	-0,5458734763	-0,5426540974	-0,5396394737	-0,5369241526
2,5	-0,3902798539	-0,3861314638	-0,3831446417	-0,3804202483
3	-0,2459515458	-0,242801772	-0,2405756076	-0,238517499
3,5	-0,1176917526	-0,1160582967	-0,1148847044	-0,1137908793
4	0	0	0	0

Tabla 18: Función de onda del estado fundamental en 10ma, 11ava, 12ava y 13ava aproximación del átomo de Hidrógeno de x entre 0,005 y 4. El paso entre 0,5 y 4 es de 0,5

x_i	$\phi_n^{(10)}(h_i)$	$\phi_n^{(11)}(h_i)$	$\phi_n^{(12)}(h_i)$	$\phi_n^{(13)}(h_i)$
0,005	-0,05365533937	-0,05771863474	-0,06313466595	-0,06849376714
0,5	-0,65845249	-0,6541048797	-0,6630333829	-0,6688669545
1	-0,7723228	-0,7752027456	-0,77375	-0,7742841107
1,5	-0,68547837	-0,6864391766	-0,6836755841	-0,6818011036
2	-0,5344384	-0,5344166655	-0,5314131634	-0,5284076794
2,5	-0,37796048	-0,3776059223	-0,3749284976	-0,3719492887
3	-0,2366927721	-0,2363069151	-0,2343407911	-0,2320748939
3,5	-0,1128056408	-0,112615632	-0,1115897441	-0,110382
4	0	0	0	0

Figura 10: Gráfico de la 1era, 2da, 3era, 4ta, 9na y 13ava aproximación de $|\phi_n(x)|^2$ del átomo de Hidrógeno. Datos tomados de las tablas 14, 16, 17 y 18.



De los resultados obtenidos, $\lambda_1 \approx \lambda^{(13)} = 0,9862 \approx 1 u.a.$. Como $\lambda = -2E$, la energía del estado fundamental es,

$$E_1 = -\frac{1}{2} u.a.$$

Tabla 19: Valores de $\lambda^{(i)}$ para las trece primeras iteraciones en el caso del átomo de Hidrógeno

# de iteraciones	$\lambda^{(i)}(u.a.)$
1	0,6319884814
2	0,7976345
3	0,871678
4	0,90627
5	0,9236964123
6	0,935486521
7	0,9443432872
8	0,9521838857
9	0,9594881518
10	0,9641625154
11	0,9683973476
12	0,976929696
13	0,9862582354

3.4. Cálculo de la función de onda del estado fundamental y su energía para una partícula en el potencial de Airy en una dimensión usando el método de la función de Green

Se aplicará la teoría propuesta de la Función de Green al problema de una partícula en el potencial de Airy.

La ecuación de Schrödinger para este problema es (2.50) :

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = (0,04x + \lambda)\phi(x)$$

con $\lambda = -2E$.

Usando el operador $\mathcal{D}^2 = \frac{d^2}{dx^2}$, $\mathcal{D}^2 G = 0$, donde G es la función de Green, por lo que para el intervalo $[0, a]$,

$$G(x, h) = \begin{cases} G_1(x, h) = \frac{(h-a)x}{a} & 0 \leq x < h \\ G_2(x, h) = \frac{(x-a)h}{a} & h < x \leq a \end{cases} \quad (3.13)$$

Entonces la solución para la partícula en el potencial de Airy es:

$$\phi(h) = \int G(x, h)(0,04x + \lambda)\phi(x)dx \quad (3.14)$$

Esta es la llamada solución integral, la cual depende a su vez de la misma solución.

Si $\phi^{(0)}(x)$ es la solución de orden cero con autovalor $\lambda^{(0)}$, la función de onda en primera aproximación es:

$$\phi^{(1)} = \int G(x, h)(0,04x + \lambda^{(0)})\phi^{(0)}dx \quad (3.15)$$

Usando la función de prueba,

$$\phi^{(0)} = \frac{1}{(0,04x + \lambda^{(0)})}$$

Luego en 3.15 se tiene:

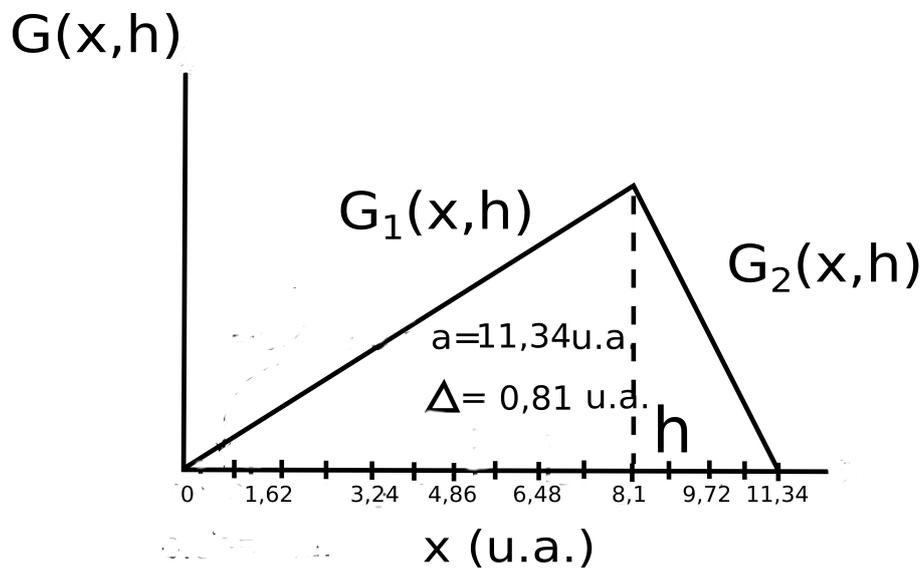
$$\phi^{(1)} = \int G(x, h)dx = A(\mathcal{R}) = \frac{a}{2}G(x, h)$$

Consideramos como intervalo de trabajo $[0, 11,34]$, es decir que tomamos $a = 11,34$, evaluando dentro de este intervalo con un paso $\Delta = 0,81$. Consideramos que $G(x, h) = 0$ en los puntos frontera del intervalo de trabajo. La figura 11 muestra el intervalo de trabajo.

En las siguientes aproximaciones se tiene (transformando las integrales en sumatorias):

$$\phi^{(2)}(h_i) = \sum_{x_i} G(x_i, h_i)(0,04x + \lambda)\phi_n^{(1)}(x_i)\Delta$$

Figura 11: Representación de la Función de Green y los pasos en x usados en el cálculo para una partícula en el potencial de Airy.



$$\phi^{(3)}(h_i) = \sum_{x_i} G(x_i, h_i)(0,04x + \lambda)\phi_n^{(2)}(x_i)\Delta$$

.....

En general, para la j-ésima aproximación ($j = 1, 2, 3, \dots$),

$$\phi^{(j+1)}(h_i) = \sum_{x_i} G(x_i, h_i)(0,04x + \lambda)\phi_n^{(j)}(x_i)\Delta$$

La función de onda normalizada correspondiente es:

$$\phi_n^{(j+1)}(h_i) = \frac{\phi^{(j+1)}(h_i)}{N}$$

siendo $N^2 = \sum_h |\phi^{(j+1)}(h_i)|^2 \Delta$

3.4.1. Resultados numéricos

Tabla 20: Valores de $G(x, h)$ para una partícula en el potencial de Airy, con x entre 0,81 y 11,34. El paso es de 0,81.

i	$x_i = h_i$	$G_1(x_i, h_i) = G_2(x_i, h_i)$
1	0,81	-0,752
2	1,62	-1,4
3	2,43	-2
4	3,24	-2,3142
5	4,05	-2,6035
6	4,86	-2,777
7	5,67	-2,835
8	6,48	-2,777
9	7,29	-2,6035
10	8,1	-2,3142
11	8,91	-2
12	9,72	-1,4
13	10,53	-0,752
14	11,34	0

Tabla 21: Valores de $h(j)$, $x(i)$ y $G(x, h)$ para valores de x y h entre 0,81 y 10,53

h	x	G usado	Valor de G
0,81	0,81	G_1	-0,752
	1,62	G_2	-0,7
	2,43	G_2	-0,6364
	3,24	G_2	-0,5785
	4,05	G_2	-0,5207
	4,86	G_2	-0,4628
	5,67	G_2	-0,405
	6,48	G_2	-0,347
	7,29	G_2	-0,3
	8,1	G_2	-0,2314
	8,91	G_2	-0,1735
	9,72	G_2	-0,1157
10,53	G_2	-0,0578	
1,62	0,81	G_1	-0,7
	1,62	G_1	-1,4
	2,43	G_2	-1,273
	3,24	G_2	-1,157
	4,05	G_2	-1,04
	4,86	G_2	-1
	5,67	G_2	-0,81
	6,48	G_2	-0,7
	7,29	G_2	-0,5785
	8,1	G_2	-0,4628
	8,91	G_2	-0,347
	9,72	G_2	-0,2314
10,53	G_2	-0,1157	
	0,81	G_1	-0,6364

	1,62	G_1	-1,273
	2,43	G_1	-2
	3,24	G_2	-1,7357
	4,05	G_2	-1,56
	4,86	G_2	-1,4
	5,67	G_2	-1,215
	6,48	G_2	-1,04
	7,29	G_2	-0,8678
	8,1	G_2	-0,7
	8,91	G_2	-0,5207
	9,72	G_2	-0,347
	10,53	G_2	-0,1735
<hr/>			
	0,81	G_1	-0,5785
	1,62	G_1	-1,157
	2,43	G_1	-1,7357
	3,24	G_1	-2,3143
3,24	4,05	G_2	-2,1
	4,86	G_2	-1,8514
	5,67	G_2	-1,62
	6,48	G_2	-1,4
	7,29	G_2	-1,157
	8,1	G_2	-1
	8,91	G_2	-0,7
	9,72	G_2	-0,4628
	10,53	G_2	-0,2314
<hr/>			
	0,81	G_1	-0,5207
	1,62	G_1	-1

	2,43	G_1	-1,56
	3,24	G_1	-2,1
	4,05	G_1	-2,6035
	4,86	G_2	-2,3143
	5,67	G_2	-2,025
	6,48	G_2	-1,7357
	7,29	G_2	-1,4464
	8,1	G_2	-1,157
	8,91	G_2	-0,8678
	9,72	G_2	-0,5785
	10,53	G_2	-0,3
	<hr/>		
	0,81	G_1	-0,4628
	1,62	G_1	-1
	2,43	G_1	-1,4
	3,24	G_1	-1,8514
4,86	4,05	G_1	-2,3143
	4,86	G_1	-2,777
	5,67	G_2	-2,43
	6,48	G_2	-2,1
	7,29	G_2	-1,7357
	8,1	G_2	-1,4
	8,91	G_2	-1
	9,72	G_2	-0,7
	10,53	G_2	-0,347
	<hr/>		
	0,81	G_1	-0,405
	1,62	G_1	-0,81
	2,43	G_1	-1,215
	3,24	G_1	-1,62

5.67

	4,05	G_1	-2,025
	4,86	G_1	-2,43
	5,67	G_1	-3
	6,48	G_2	-2,43
	7,29	G_2	-2,025
	8,1	G_2	-1,62
	8,91	G_2	-1,215
	9,72	G_2	-0,81
	10,53	G_2	-0,405
	<hr/>		
	0,81	G_1	-0,347
	1,62	G_1	-0,7
	2,43	G_1	-1
	3,24	G_1	-1,4
6,48	4,05	G_1	-1,7357
	4,86	G_1	-2,1
	5,67	G_1	-2,43
	6,48	G_1	-2,777
	7,29	G_2	-2,3143
	8,1	G_2	-1,8514
	8,91	G_2	-1,4
	9,72	G_2	-1
	10,53	G_2	-0,4628
	<hr/>		
	0,81	G_1	-0,3
	1,62	G_1	-0,5785
	2,43	G_1	-0,8678
	3,24	G_1	-1,157
7,29	4,05	G_1	-1,4464
	4,86	G_1	-1,7357

	5,67	G_1	-2,025
	6,48	G_1	-2,3143
	7,29	G_1	-2,6035
	8,1	G_2	-2,1
	8,91	G_2	-1,5621
	9,72	G_2	-1
	10,53	G_2	-0,5207
<hr/>			
	0,81	G_1	-0,2314
	1,62	G_1	-0,4628
	2,43	G_1	-0,7
	3,24	G_1	-1
8,1	4,05	G_1	-1,157
	4,86	G_1	-1,4
	5,67	G_1	-1,62
	6,48	G_1	-1,8514
	7,29	G_1	-2,1
	8,1	G_1	-2,3143
	8,91	G_2	-1,7357
	9,72	G_2	-1,157
	10,53	G_2	-0,5785
<hr/>			
	0,81	G_1	-0,1735
	1,62	G_1	-0,347
	2,43	G_1	-0,5207
	3,24	G_1	-0,7
8,91	4,05	G_1	-0,87
	4,86	G_1	-1,0
	5,67	G_1	-1,215
	6,48	G_1	-1,4

	7,29	G_1	-1,5621
	8,1	G_1	-1,7357
	8,91	G_1	-2
	9,72	G_2	-1,273
	10,53	G_2	-0,6364
<hr/>			
	0,81	G_1	-0,1157
	1,62	G_1	-0,2314
	2,43	G_1	-0,347
	3,24	G_1	-0,4628
9,72	4,05	G_1	-0,5785
	4,86	G_1	-0,7
	5,67	G_1	-0,81
	6,48	G_1	-0,925
	7,29	G_1	-1
	8,1	G_1	-1,157
	8,91	G_1	-1,273
	9,72	G_1	-1,4
	10,53	G_2	-0,7
<hr/>			
	0,81	G_1	-0,0578
	1,62	G_1	-0,1157
	2,43	G_1	-0,1735
	3,24	G_1	-0,2314
10,53	4,05	G_1	-0,3
	4,86	G_1	-0,347
	5,67	G_1	-0,405
	6,48	G_1	-0,4628
	7,29	G_1	-0,5207
	8,1	G_1	-0,5785

8,91	G_1	-0,6364
9,72	G_1	-0,7
10,53	G_1	-0,752

Figura 12: Gráfica de las tres primeras aproximaciones para el cuadrado de la función de onda normalizada $\phi_n(x)$ del potencial de Airy correspondientes a los datos de la tabla 22.

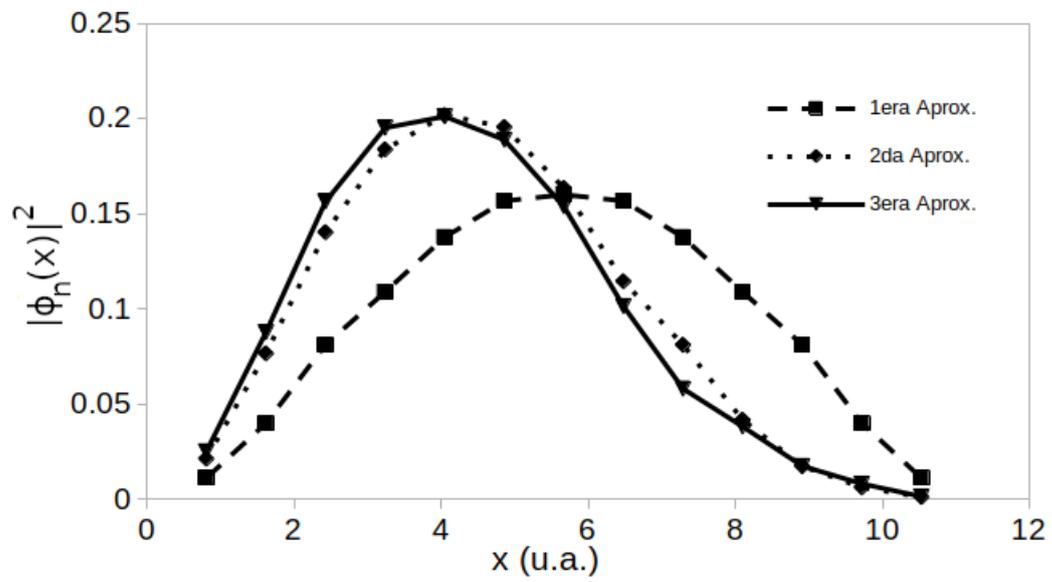


Tabla 22: Función de onda del estado fundamental en primera, segunda y tercera aproximación para el potencial de Airy, con valores de x entre 0,81 y 10,53 con un paso de 0,81.

x_i	$\phi_n^{(1)}(x_i)$	$\phi_n^{(2)}(x_i)$	$\phi_n^{(3)}(x_i)$
0,81	-0,10718	-0.1462	-0.1586678
1,62	-0,2	-0.276846	-0.29619277
2,43	-0,285	-0.37448	-0.39545
3,24	-0,33	-0.42858	-0.4416349
4,05	-0,371	-0.449118	-0.4483123
4,86	-0,3958	-0.442132	-0.43447678
5,67	-0,4	-0.404326	-0.39217377
6,48	-0,3958	-0.338338	-0.31841
7,29	-0,371	-0.28485	-0.241
8,1	-0,33	-0.204412	-0.19551935
8,91	-0,285	-0.132116	-0.1322838
9,72	-0,2	-0.07929	-0.09042
10,53	-0,10718	-0.035634	-0.038564

Tabla 23: Valores de $\lambda^{(i)}$ para las tres primeras iteraciones en el caso de una partícula en el potencial de Airy.

# de iteraciones	$\lambda^{(i)}(u.a.)$
1	-0,30
2	-0,27765
3	-0,2756288

La figura 12 muestra la gráfica de las tres primeras aproximaciones correspondientes a los datos de la tabla 22.

La Tabla 23 muestra los valores de $\lambda^{(i)}$ para las tres primeras iteraciones en el cálculo del nivel de energía de una partícula en el potencial de Airy.

De los resultados obtenidos, $\lambda_1 \approx \lambda^{(3)} = -0,2756288 \text{ u.a.}$, luego la energía del estado fundamental para una partícula en el potencial de Airy es, en tercera aproximación, $E_1 = 0,1378144 \text{ u.a.}$

Capítulo IV. Resultados numéricos usando el método Monte Carlo y la función de Green

4.1. Cálculo de integrales usando el método Monte Carlo

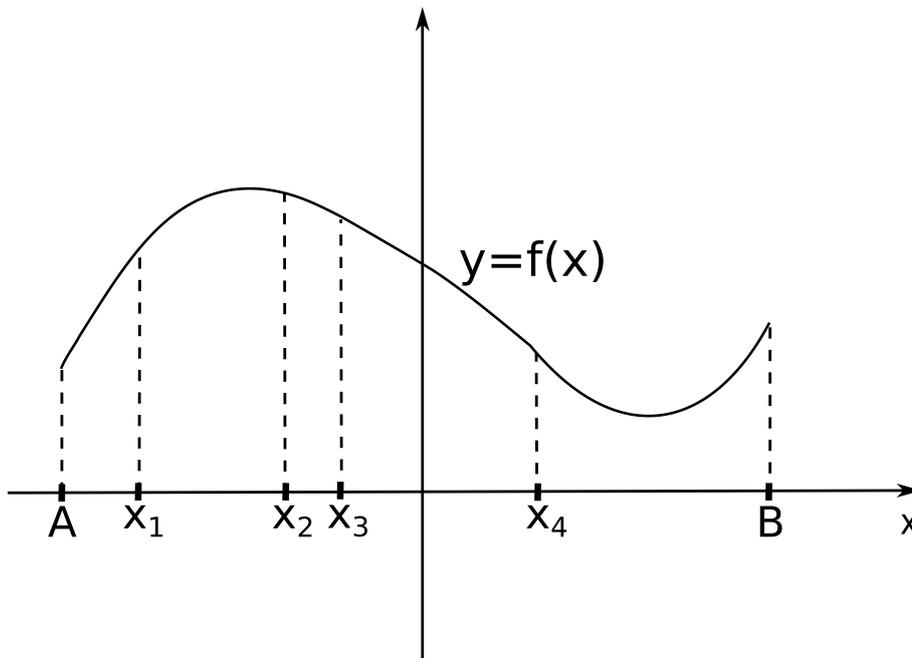
Definimos el conjunto de N números aleatorios,

$$X = \{x_i \in \langle A, B \rangle / i = 1, 2, \dots, N\}$$

donde A, B son dos números reales arbitrarios.

La figura 13 es una ilustración de lo planteado.

Figura 13: La figura muestra cuatro números arbitrarios elegidos entre A y B .



Para el cálculo de las integrales se usará la siguiente ecuación:

$$Integral = \sum_i f(x_i) \cdot \Delta_i$$

donde Δ_i depende solamente del número de datos, es decir:

$$\Delta_i = \frac{B - A}{N + 1}$$

4.2. Cálculo de la función de onda y la energía del estado fundamental para el Pozo Infinito usando el método Green-Monte Carlo

Con el fin de poder mostrar el método de cálculo, primero se hará un cálculo sencillo considerando 5 puntos aleatorios y los dos valores de frontera.

Consideramos que el pozo de potencial tiene un ancho "a".

Paso 1.- Se escogen 5 números aleatorios entre $\langle 0, 2 \rangle$:

$$\{0, 242; 0, 064; 0, 76; 1, 336; 1, 546\}$$

Paso 2.- Función de onda del estado fundamental en primera aproximación.

Para el pozo infinito,

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = \lambda\phi(x)$$

La solución en primera aproximación, usando el método de Green es,

$$\phi^{(1)}(h) = \int G(x, h) \lambda^{(0)} \phi^{(0)}(x) dx$$

donde, G viene dado por la ecuación 3.13, con $a = 2$.

Por comodidad tomamos como solución de orden cero $\phi^{(0)} = \frac{1}{\lambda^{(0)}}$, entonces

$$\phi^{(1)}(x = h) = G(x = h, h),$$

es decir que $\phi^{(1)}(x = h)$ es el área bajo la curva que describe $G(x, h)$.

Evaluando para los números aleatorios del Paso 1,

$$\phi^{(1)}(0,064) = -0,062$$

$$\phi^{(1)}(0,242) = -0,21272$$

$$\phi^{(1)}(0,76) = -0,4712$$

$$\phi^{(1)}(1,336) = -0,44355$$

$$\phi^{(1)}(1,546) = -0,351$$

para el paso $\Delta_i = \Delta$ se tiene

$$\Delta = \frac{2 - (0)}{(5 + 1)} = 0,3333$$

Normalizando la función $\phi^{(1)}$ se tiene:

$$\phi_n^{(1)}(0,064) = -0,14$$

$$\phi_n^{(1)}(0,242) = -0,4792637$$

$$\phi_n^{(1)}(0,76) = -1,061626$$

$$\phi_n^{(1)}(1,336) = -0,99933$$

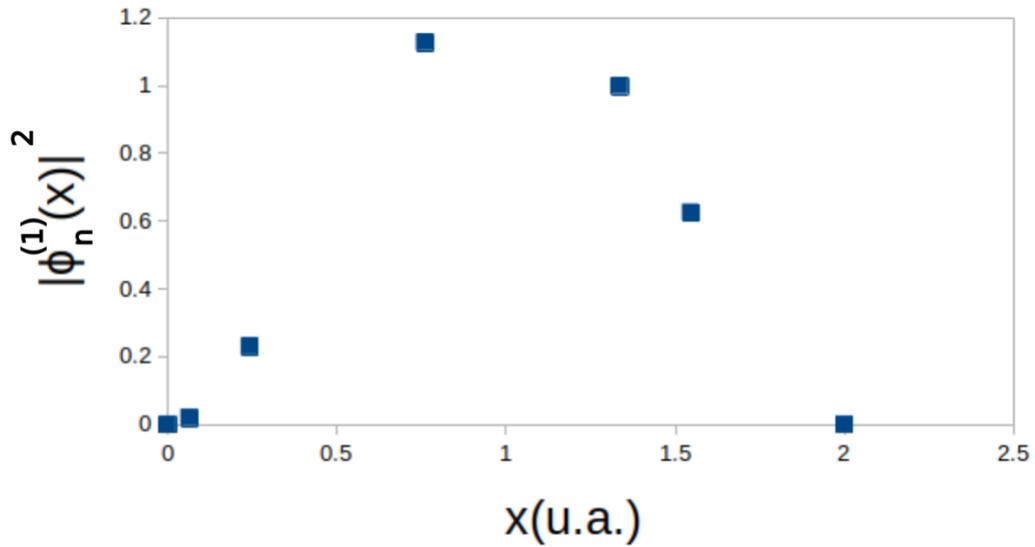
$$\phi_n^{(1)}(1,546) = -0,7908$$

la siguiente figura muestra el gráfico $\phi_n^{(1)}(x)$ vs x para los resultados obtenidos.

Paso 3.- Valor propio $\lambda^{(1)}$ del estado fundamental en primera aproximación.

En primera aproximación, para el pozo infinito,

Figura 14: Cuadrado de la función de onda del estado fundamental del pozo infinito en primera aproximación, usando el método de Green Monte Carlo para 5 puntos aleatorios y los puntos extremos fijos.



$$\frac{d^2 \phi(x)_n^{(1)}}{dx^2} = \lambda^{(1)} \phi(x)_n^{(1)}$$

Por lo tanto en segunda aproximación,

$$\phi^{(2)}(h) = \int G(x, h) \lambda^{(1)} \phi_n^{(1)}(x) dx$$

Aproximamos la integral por una sumatoria. Entonces,

$$\phi^{(2)}(h) = \sum_x G(x, h) \lambda^{(1)} \phi_n^{(1)}(x) \Delta \quad (4.1)$$

Para realizar este cálculo se necesitan dos conjuntos de números aleatorios, el conjunto de los x_i y el conjunto de los h_j .

El conjunto de los x_i es el usado para construir $\phi_n^{(1)}$. El conjunto de los h_j debe generarse de

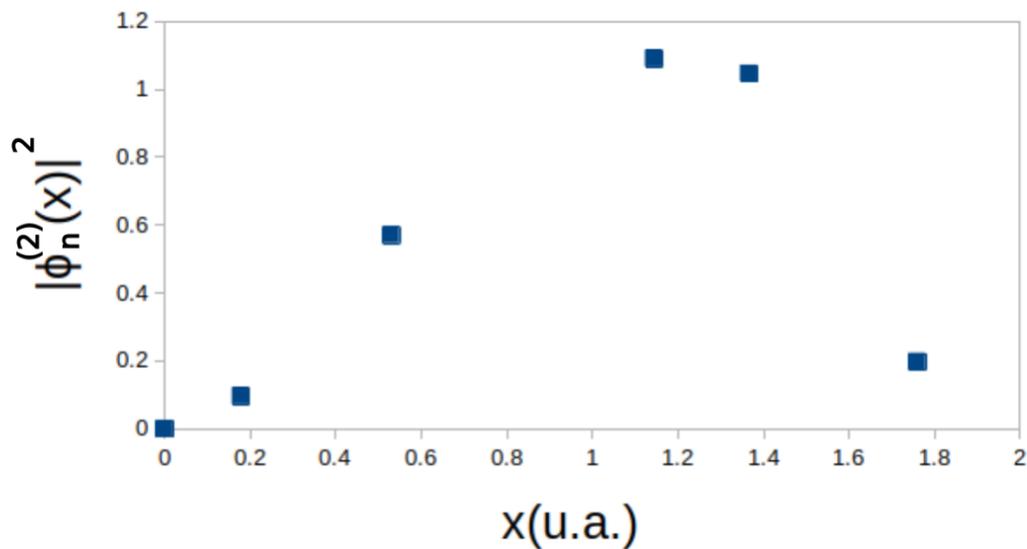
manera aleatoria, los cuales pueden ser (como ejemplo):

$$h_j = \{0, 178; 0, 53; 1, 144; 1, 366; 1, 76\}$$

Los valores de $G(x, h)$ deben calcularse para todas las combinaciones de los x_i y los h_j usando 3.13 y luego junto con los valores hallados para $\phi^{(1)}$ se calcula $\phi^{(2)}(h)$ usando 4.1. Los resultados obtenidos para $\phi^{(2)}$ son:

$$\phi^{(2)}(0, 178) = -0,097095\lambda^{(1)}$$

Figura 15: Cuadrado de la función de onda del estado fundamental del pozo infinito en segunda aproximación, usando el método de Green Monte Carlo para 5 puntos aleatorios y los puntos extremos fijos.



$$\phi^{(2)}(0, 53) = -0,2371953611\lambda^{(1)}$$

$$\phi^{(2)}(1, 144) = -0,3278668332\lambda^{(1)}$$

$$\phi^{(2)}(1, 366) = -0,3212140237\lambda^{(1)}$$

$$\phi^{(2)}(1, 76) = -0,1395572325\lambda^{(1)}$$

La condición de normalización permite encontrar $\lambda^{(1)}$:

$$\lambda^{(1)} = -3,184431274$$

Usando este valor de lambda se puede encontrar $\phi^{(2)}(h_j)$ y de aquí $\phi_n^{(2)}(h_j)$. Los resultados obtenidos son,

$$\phi_n^{(2)}(0,178) = -0,30919235$$

$$\phi_n^{(2)}(0,53) = -0,755332326$$

$$\phi_n^{(2)}(1,144) = -1,04407$$

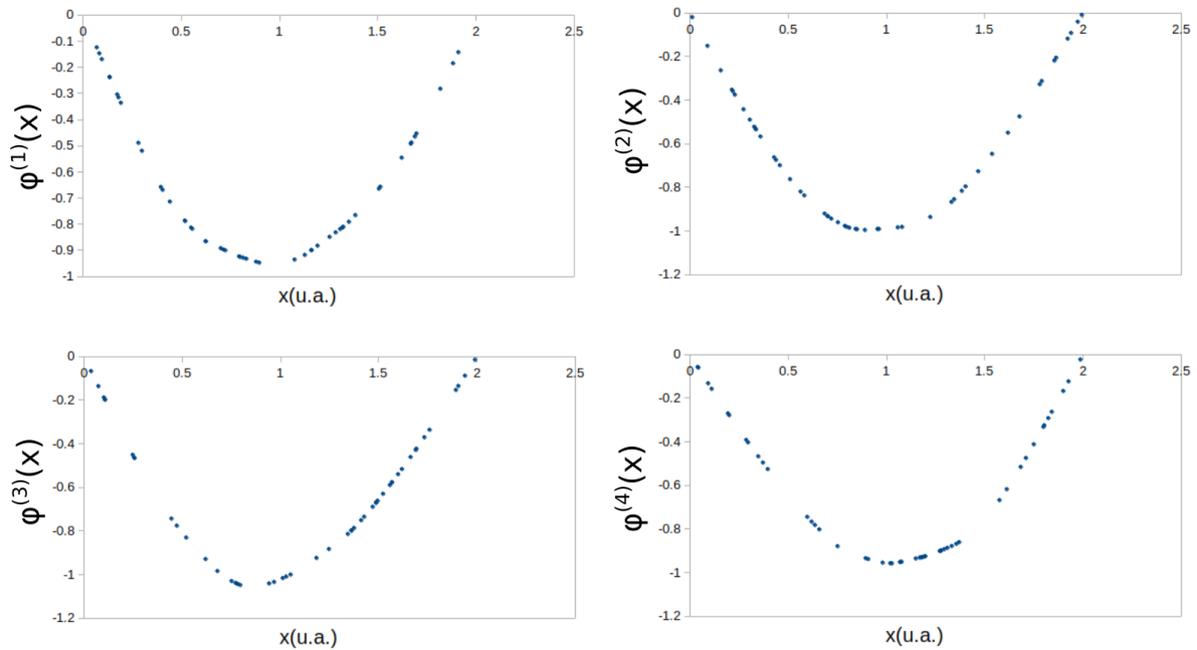
$$\phi_n^{(2)}(1,366) = -1,022884$$

$$\phi_n^{(2)}(1,76) = -0,4444104$$

la figura 15 muestra el gráfico $\phi_n^{(2)}(x)$ vs x para los resultados obtenidos.

Cálculo usando 50 y 1000 puntos

Figura 16: Función de onda del estado fundamental en primera, segunda, tercera y cuarta aproximación para el pozo infinito calculada usando el Método Green Monte Carlo, considerando 50 puntos entre 0 u.a. y 2 u.a.



Usando el método Green-Monte Carlo se cálculo la energía del estado fundamental y su correspondiente función de onda para el pozo infinito usando 50 puntos y 1000 puntos entre 0 y 2.

En el caso de 50 puntos, en la figura 16 se muestra los resultados para las cuatro primeras aproximaciones.

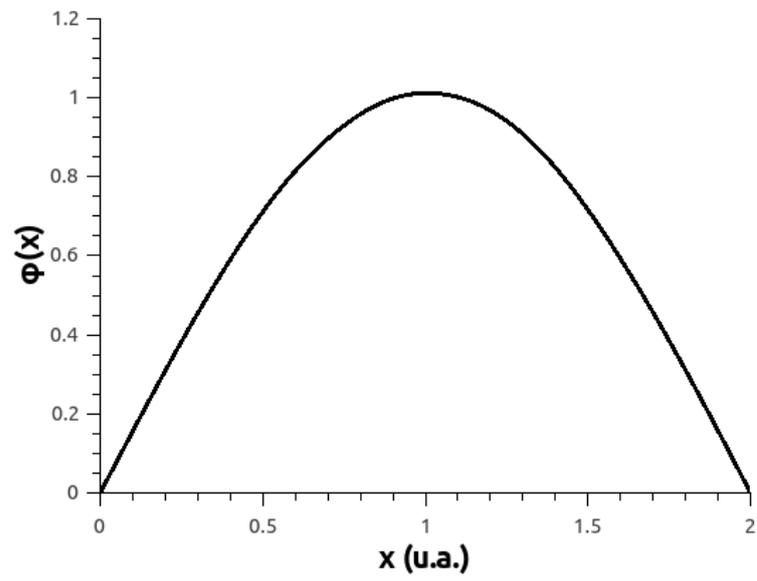
Para el cálculo de 1000 puntos entre 0 y 2, se obtuvo una convergencia luego de 22 iteraciones y la energía del estado fundamental obtenida fue:

$$\lambda = -2,4658u.a.,$$

por lo que la energía correspondiente es $E = -\lambda/2 = 1,233u.a.$

La función de onda calculada se muestra en la figura 17.

Figura 17: Función de onda para el estado fundamental del pozo infinito calculada usando el Método Green Monte Carlo, considerando 1000 puntos entre 0 u.a. y 2 u.a.



4.3. Cálculo de la función de onda y la energía del estado fundamental para el oscilador armónico simple usando el método Green-Monte Carlo

En lo que sigue se muestra, a manera de ejemplo, el cálculo de la función de onda del estado fundamental y su energía para el oscilador armónico simple usando el método de Green-Monte Carlo con 6 números aleatorios y los dos puntos extremos.

Paso 1.- Generación de los números aleatorios entre -2 y 2 .

El conjunto de valores de los $x(i)$ que se usan son:

$$x(i) = \{-0,948; 1,52; 0,484; -1,436; -1,54; 0,46\}$$

Paso 2.- Se encuentra en primera aproximación la función de onda $\phi^{(1)}$

Para el oscilador armónico,

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = (x^2 + \lambda)\phi(x)$$

La solución en primera aproximación, usando el método de Green es,

$$\phi^{(1)}(h) = \int G(x, h)(x^2 + \lambda^{(0)})\phi^{(0)}(x)dx$$

donde, G viene dado por la ecuación 3.8, con $-2 \leq x \leq 2$.

Por comodidad tomamos como solución de orden cero $\phi^{(0)} = \frac{1}{x^2 + \lambda^{(0)}}$, entonces al igual que en el pozo infinito,

$$\phi^{(1)}(x = h) = 2G(x = h, h),$$

es decir que $\phi^{(1)}(x = h)$ es el área bajo la curva que describe $G(x, h)$.

Los valores obtenidos para $\phi^{(1)}$ para los números aleatorios del Paso 1 son:

$$\phi^{(1)}(-2) = 0$$

$$\phi^{(1)}(-1, 54) = -0,312869445$$

$$\phi^{(1)}(-1, 436) = -0,37233539$$

$$\phi^{(1)}(-0, 948) = -0,595650856$$

$$\phi^{(1)}(0, 46) = -0,7278768$$

$$\phi^{(1)}(0, 484) = -0,723523849$$

$$\phi^{(1)}(1, 52) = -0,3246279875$$

$$\phi^{(1)}(2) = 0$$

Los valores obtenidos para $\phi_n^{(1)}$, para los números aleatorios del Paso 1 son:

$$\phi^{(1)}(-2) = 0$$

$$\phi_n^{(1)}(-1, 54) = -0,4071$$

$$\phi_n^{(1)}(-1, 436) = -0,484476$$

$$\phi_n^{(1)}(-0, 948) = -0,775324$$

$$\phi_n^{(1)}(0, 46) = -0,9471$$

$$\phi_n^{(1)}(0, 484) = -0,941436$$

$$\phi_n^{(1)}(1, 52) = -0,4224$$

$$\phi_n^{(1)}(2) = 0$$

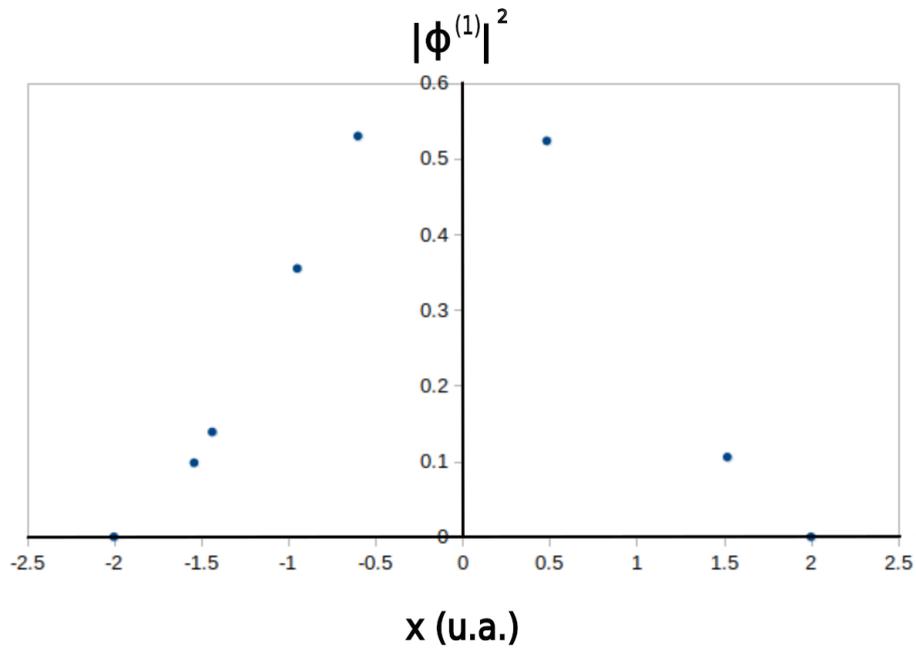
la figura 18 muestra el gráfico $|\phi_n^{(1)}(x)|^2$ vs x para los resultados obtenidos.

Paso 3.- Valor propio $\lambda^{(1)}$ del estado fundamental en primera aproximación.

En primera aproximación, para el oscilador armónico,

$$\frac{d^2\phi(x)_n^{(1)}}{dx^2} = (x^2 + \lambda^{(1)})\phi(x)_n^{(1)}$$

Figura 18: Cuadrado de la función de onda en primera aproximación para el oscilador armónico usando el método de Green Monte Carlo para 6 puntos aleatorios y los puntos extremos.



Por lo tanto en segunda aproximación,

$$\phi^{(2)}(h) = \int G(x, h)(x^2 + \lambda^{(1)})\phi_n^{(1)}(x)dx$$

Aproximamos la integral por una sumatoria (3.2),

$$\phi^{(2)}(h_i) = \sum_{x_i} G(x_i, h_i)(x_i^2 + \lambda^{(1)})\phi_n^{(1)}(x_i)\Delta$$

Igual que para el caso del pozo infinito, para realizar este cálculo se necesitan dos conjuntos de números aleatorios, el conjunto de los x_i y el conjunto de los h_j .

El conjunto de los x_i es el usado para construir $\phi_n^{(1)}$. El conjunto de los h_j debe

generarse de manera aleatoria, tomamos:

$$h(j) = \{1, 168 : 0, 532; -1, 536; -1, 32; -0, 508; 1, 924\}$$

Para el paso $\Delta_i = \Delta$ se tiene

$$\Delta = \frac{2 - (-2)}{(6 + 1)} = 0,5714$$

Los valores de $G(x, h)$ deben calcularse para todas las combinaciones de los x_i y los h_j usando 3.8 y luego junto con los valores hallados para $\phi_n^{(1)}(h)$ se calcula $\phi^{(2)}(h)$ usando

3.2. Los resultados obtenidos para $\phi^{(2)}$ son:

La función de Green se evalúa usando 3.8 para los $x(i) \neq h(j)$ y de aquí se calcula $\phi^{(2)}(h)$. Los resultados se muestran a continuación:

$$\phi^{(2)}(-1, 536) = 0,475927558 \lambda^{(1)} + 0,5186788926$$

$$\phi^{(2)}(-1, 32) = 0,6340712285 \lambda^{(1)} + 0,61752868$$

$$\phi^{(2)}(-0, 508) = \lambda^{(1)} + 0,6917583307$$

$$\phi^{(2)}(0, 532) = 0,874 \lambda^{(1)} + 0,5489258162$$

$$\phi^{(2)}(1, 168) = 0,5339106445 \lambda^{(1)} + 0,4$$

$$\phi^{(2)}(1, 924) = 0,05473937684 \lambda^{(1)} + 0,05034393128$$

De la condición de normalizando para $\phi^{(2)}(h)$ se tiene que:

$$2,680486339 \lambda^{(1)2} + 4,0525 \lambda^{(1)} - 0,157246885 = 0$$

luego $\lambda^{(1)}$ puede ser 0,0378546141 o $-1,549707124$. Escogemos el menor de estos dos valores.

Luego, el autovalor del estado fundamental, en primera aproximación es,

$$\lambda^{(1)} = -1,549707124$$

Reemplazando este valor en los $\phi_n^{(2)}(h)$ anteriores, encontramos los valores de $\phi_n^{(2)}$:

$$\phi_n^{(2)}(-2) = 0$$

$$\phi_n^{(2)}(-1,536) = -0,2188694345$$

$$\phi_n^{(2)}(-1,32) = -0,36509602$$

$$\phi_n^{(2)}(-0,508) = -0,8579487933$$

$$\phi_n^{(2)}(0,532) = -0,8055182102$$

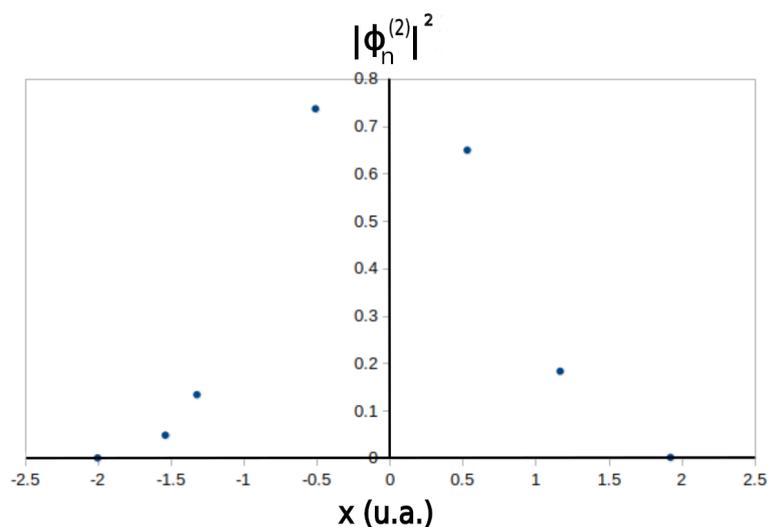
$$\phi_n^{(2)}(1,168) = -0,4274051294$$

$$\phi_n^{(2)}(1,924) = -0,03448607097$$

$$\phi_n^{(2)}(2) = 0$$

La figura 19 muestra los valores de $|\phi_n^{(2)}|^2$, para los 6 puntos aleatorios y los puntos extremos fijos, del cuadrado de la función de onda del estado fundamental del oscilador armónico en segunda aproximación.

Figura 19: Cuadrado de la función de onda en segunda aproximación para el oscilador armónico usando el método de Green Monte Carlo usando 6 puntos aleatorios y los puntos extremos.



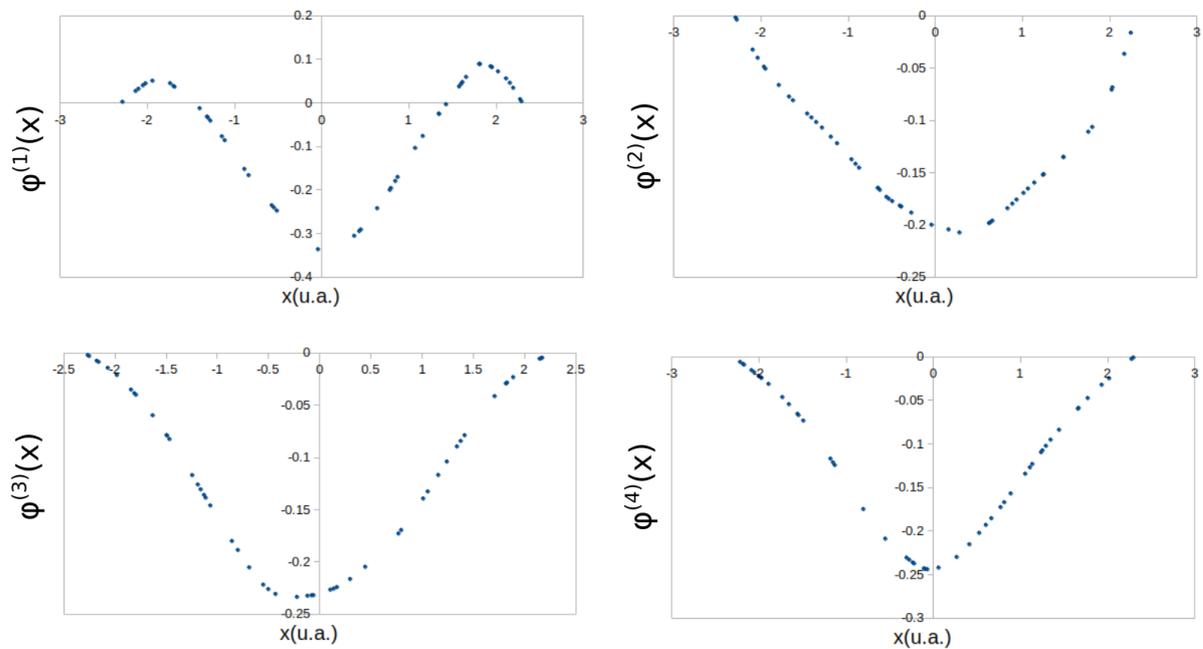
El proceso puede seguir hasta encontrar la aproximación al estado fundamental que se requiere.

Cálculo usando 50 y 1000 puntos

Usando el método Green-Monte Carlo se cálculo la energía del estado fundamental y su correspondiente función de onda para el oscilador armónico usando 50 puntos y 1000 puntos entre -2.2 y 2.2.

En el caso de 50 puntos, en la figura 20 se muestra los resultados para las cuatro primeras aproximaciones.

Figura 20: Función de onda para el estado fundamental del oscilador armónico simple calculada usando el Método Green Monte Carlo, considerando 50 puntos entre -2.2 u.a. y 2.2 u.a.

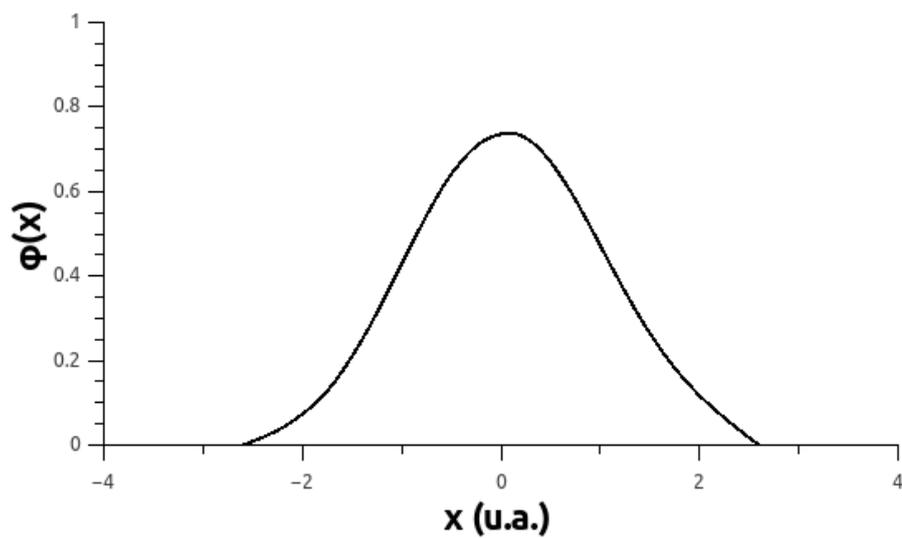


Para el caso de 1000 puntos el criterio para terminar un cálculo fue que la diferencia entre $\lambda^{(n+1)}$ y $\lambda^{(n)}$ (para la n-ésima aproximación) sea menor o igual que 0,01.

El cálculo se realizó considerando 1000 puntos entre -2.2 y 2.2. Se obtuvo una convergencia luego de 13 iteraciones. El cálculo obtenido para la energía del estado fundamental es:

$$\lambda = -1,026u.a. \approx -1,$$

Figura 21: Función de onda para el estado fundamental del oscilador armónico simple calculada usando el Método Green Monte Carlo considerando 1000 puntos aleatorios entre -2.2 u.a. y 2.2 u.a..



por lo que la energía correspondiente en unidades atómicas es $E = \frac{\epsilon}{2}$

La función de onda calculada se muestra en la figura 21.

4.4. Cálculo de la función de onda y la energía del estado fundamental del átomo de Hidrógeno usando el método Green-Monte Carlo

Con el fin de poder mostrar el método de cálculo, primero se hizo un cálculo sencillo considerando 7 puntos aleatorios en el intervalo $[0, 4]$ y los dos valores de frontera 0 y 4.

Paso 1.- Se escogen 7 números aleatorios entre 0 y 4:

$$\{3, 616; 2, 468; 1, 568; 0, 832; 3, 484; 0, 288; 0, 048\}$$

Paso 2.- Función de onda del estado fundamental en primera aproximación.

Para el átomo de Hidrógeno,

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = \left(-\frac{2}{x} + \lambda\right)\phi(x)$$

La solución en primera aproximación, usando el método de Green es,

$$\phi^{(1)}(h) = \int G(x, h)\lambda^{(0)}\phi^{(0)}(x)dx$$

donde, G viene dado por la ecuación 2.49, con $a = 4$.

Por comodidad tomamos como solución de orden cero $\phi^{(0)} = \frac{1}{\lambda^{(0)} - \frac{2}{x}}$, entonces

$$\phi^{(1)}(x = h) = 2G(x = h, h),$$

es decir que $\phi^{(1)}(x = h)$ es el área bajo la curva que describe $G(x, h)$.

Evaluando para los números aleatorios del Paso 1,

$$\phi^{(1)}(0, 048) = -0, 094848$$

$$\phi^{(1)}(0, 288) = -0, 534528$$

$$\phi^{(1)}(0, 832) = -1, 317888$$

$$\phi^{(1)}(1,568) = -1,906688$$

$$\phi^{(1)}(2,468) = -1,890488$$

$$\phi^{(1)}(3,484) = -0,9$$

$$\phi^{(1)}(3,616) = -0,694272$$

$$\phi^{(1)}(4) = 0$$

para el paso $\Delta_i = \Delta$ se tiene

$$\Delta = \frac{4 - (0)}{(7 + 1)} = 0,5$$

Normalizando la función $\phi^{(1)}$ se tiene:

$$\phi_n^{(1)}(0,048) = -0,0413302376$$

$$\phi_n^{(1)}(0,288) = -0,2329218$$

$$\phi_n^{(1)}(0,832) = -0,57427277$$

$$\phi_n^{(1)}(1,568) = -0,83084375$$

$$\phi_n^{(1)}(2,468) = -0,82378456$$

$$\phi_n^{(1)}(3,484) = -0,392177$$

$$\phi_n^{(1)}(3,616) = -0,3025306$$

$$\phi_n^{(1)}(4) = 0$$

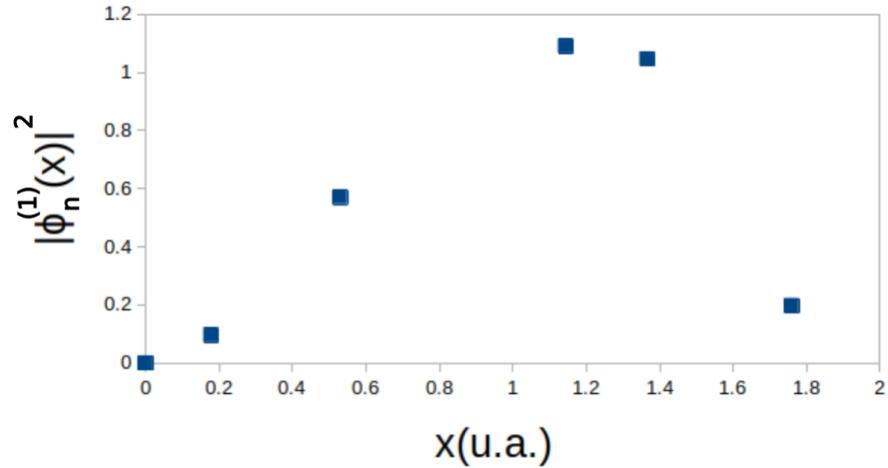
la siguiente figura muestra el gráfico $\phi_n^{(1)}(x)$ vs x para los resultados obtenidos.

Paso 3.- Valor propio $\lambda^{(1)}$ del estado fundamental en primera aproximación.

En primera aproximación, para el átomo de Hidrógeno,

$$\frac{d^2\phi(x)_n^{(1)}}{dx^2} = \left(-\frac{2}{x} + \lambda^{(1)}\right)\phi(x)_n^{(1)}$$

Figura 22: Cuadrado de la función de onda del estado fundamental del átomo de Hidrógeno en primera aproximación, usando el método de Green Monte Carlo para 7 puntos aleatorios con los puntos extremos fijos.



Por lo tanto en segunda aproximación,

$$\phi^{(2)}(h) = \int G(x, h) \left(-\frac{2}{x} + \lambda^{(1)}\right) \phi_n^{(1)}(x) dx$$

Aproximamos la integral por una sumatoria. Entonces,

$$\phi^{(2)}(h) = \sum_x G(x, h) \left(-\frac{2}{x} + \lambda^{(1)}\right) \phi_n^{(1)}(x) \Delta \quad (4.2)$$

Para realizar este cálculo se necesitan dos conjuntos de números aleatorios, el conjunto de los x_i y el conjunto de los h_j .

El conjunto de los x_i es el usado para construir $\phi_n^{(1)}$. El conjunto de los h_j debe generarse de manera aleatoria, los cuales pueden ser (como ejemplo):

$$h_j = \{1, 128; 0, 384; 0, 048; 0, 492; 1, 824; 3, 38; 1, 94\}$$

Los valores de $G(x, h)$ deben calcularse para todas las combinaciones de los x_i y los h_j usando 2.49 y luego junto con los valores hallados para $\phi^{(1)}$ se calcula $\phi^{(2)}$ usando 4.2. Los resultados obtenidos para $\phi^{(2)}$ son:

$$\phi^{(2)}(0, 048) = -0,125770732 + 0,03868889\lambda^{(1)}$$

$$\phi^{(2)}(0, 384) = -0,6393825368 + 0,2914145479\lambda^{(1)}$$

$$\phi^{(2)}(0, 492) = -0,7424801623 + 0,3640037443\lambda^{(1)}$$

$$\phi^{(2)}(1, 128) = -1,142608697 + 0,70409\lambda^{(1)}$$

$$\phi^{(2)}(1, 824) = -1,18837884 + 0,86409162\lambda^{(1)}$$

$$\phi^{(2)}(1, 94) = -1,156682253 + 0,8595669538\lambda^{(1)}$$

$$\phi^{(2)}(3, 38) = -0,4642166885 + 0,4355306938\lambda^{(1)}$$

La condición de normalización permite encontrar $\lambda^{(1)}$:

$$\lambda^{(1)} = 0,57926856$$

Usando este valor de lambda se puede encontrar $\phi^{(2)}(h_j)$ y de aquí $\phi_n^{(2)}(h_j)$. Los resultados obtenidos son,

$$\phi_n^{(2)}(0, 048) = -0,103359474$$

$$\phi_n^{(2)}(0, 384) = -0,47057525$$

$$\phi_n^{(2)}(0, 492) = -0,5316242375$$

$$\phi_n^{(2)}(1, 128) = -0,734751496$$

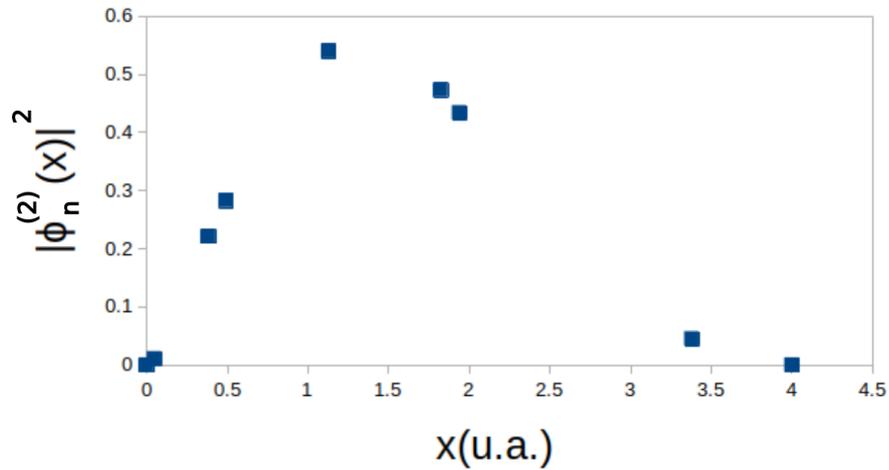
$$\phi_n^{(2)}(1, 824) = -0,68783773$$

$$\phi_n^{(2)}(1, 94) = -0,6587621414$$

$$\phi_n^{(2)}(3, 38) = -0,21192745$$

la siguiente figura muestra el gráfico $\phi_n^{(2)}(x)$ vs x para los resultados obtenidos.

Figura 23: Cuadrado de la función de onda del estado fundamental del átomo de Hidrógeno en segunda aproximación, usando el método de Green Monte Carlo para 7 puntos aleatorios con los puntos extremos fijos.



Cálculo usando 1000 puntos

Usando el método Green-Monte Carlo se cálculo la energía del estado fundamental y su correspondiente función de onda para el átomo de Hidrógeno usando 50 puntos y 1000 puntos entre 0 y 6.

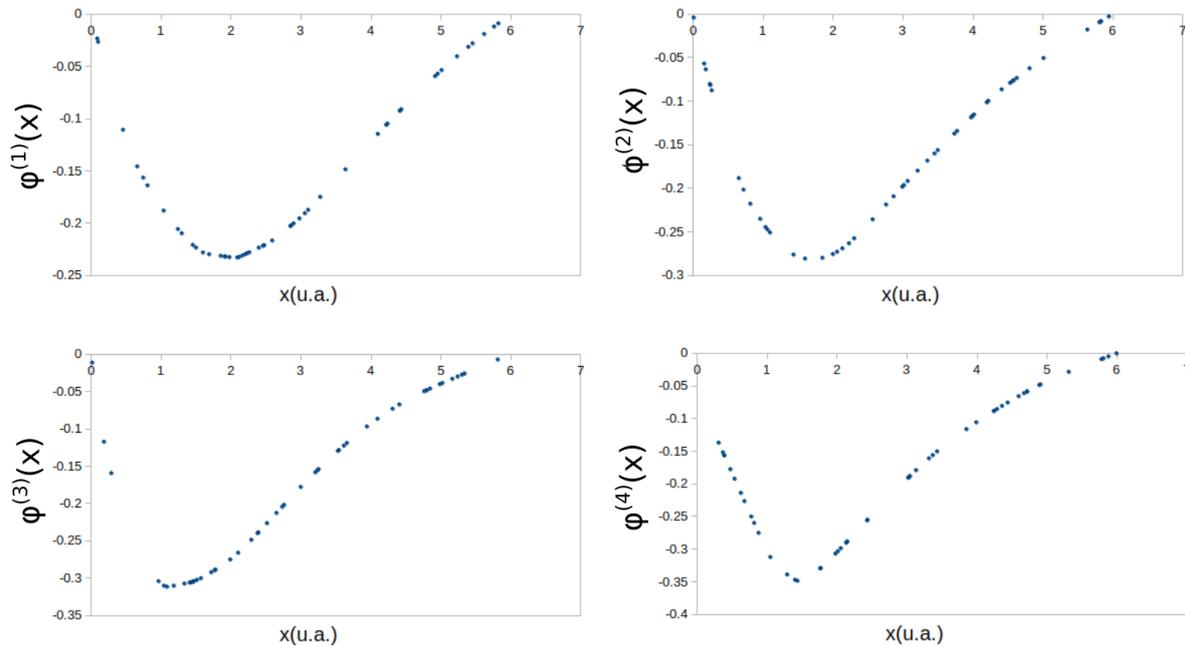
En el caso de 50 puntos, en la figura 24 se muestra los resultados para las cuatro primeras aproximaciones.

Para el cálculo con 1000 puntos, el criterio para terminar un cálculo fue que la diferencia entre $\lambda^{(n+1)}$ y $\lambda^{(n)}$ (para la n-ésima aproximación) sea menor o igual que 0,01. El cálculo se realizó considerando 1000 puntos entre 0 y 6. Se obtuvo una convergencia luego de 1032 iteraciones.

El cálculo obtenido para la energía del estado fundamental es:

$$\lambda = 1,01u.a. \approx 1u.a.,$$

Figura 24: Primera, segunda, tercera y cuarta aproximación de la función de onda para el estado fundamental del átomo de hidrógeno calculada usando el Método Green Monte Carlo, considerando 50 puntos entre 0 y 6 u.a.



por lo que la energía correspondiente es $E = -\frac{1}{2} u.a.$ La función de onda calculada se muestra en la figura 25.

4.5. Cálculo de la función de onda y la energía del estado fundamental de una partícula en el potencial de Airy usando el método Green-Monte Carlo

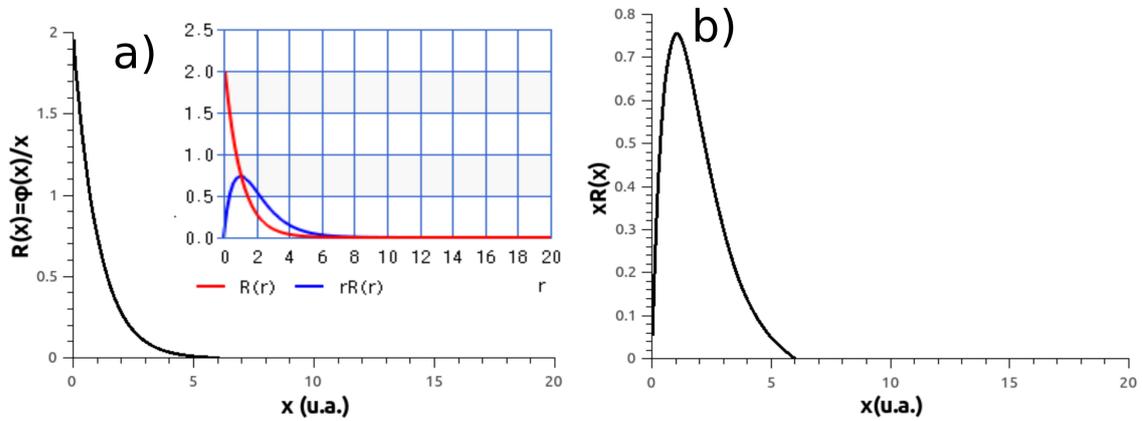
Con el fin de poder mostrar el método de cálculo, primero se hizo un cálculo sencillo considerando 7 puntos aleatorios entre 0 y 11,34 y los dos valores de frontera 0 y 11,34.

Paso 1.- Se escogen 7 números aleatorios entre 0 y 11,34:

$$\{0, 13608; 0, 81648; 2, 35872; 4, 44528; 7; 9, 87714; 10, 25136\}$$

Paso 2.- Función de onda del estado fundamental en primera aproximación.

Figura 25: Resultado obtenido para $R(x)$ en el átomo de Hidrógeno usando 1000 puntos. La figura insertada muestra la función analítica exacta para $R(r)$ y $rR(r)$. b) Resultado obtenido para $xR(x)$ en el átomo de Hidrógeno. Las curvas calculadas mostradas en a) y b) son muy similares a las funciones analíticas equivalentes mostradas en la figura insertada en a).



Para el potencial de Airy,

$$\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} = (0,04x + \lambda)\phi(x)$$

La solución en primera aproximación, usando el método de Green es,

$$\phi^{(1)}(h) = \int G(x, h)(0,04x + \lambda^{(0)})\phi^{(0)}(x)dx$$

donde, G viene dado por la ecuación 2.53, con $a = 11,34$.

Por comodidad tomamos como solución de orden cero $\phi^{(0)} = \frac{1}{0,04x + \lambda^{(0)}}$, entonces

$$\phi^{(1)}(x = h) = \frac{11,34}{2}G(x = h, h) = 5,67G(x = h, h)$$

Con esta elección, nuevamente $\phi^{(1)}(x = h)$ es el área bajo la curva que describe $G(x, h)$.

Evaluando para los números aleatorios del Paso 1,

$$\phi^{(1)}(0,81648) = -4,2961218$$

$$\phi^{(1)}(0,13608) = -0,76231449$$

$$\phi^{(1)}(2,35872) = -10,59216238$$

$$\phi^{(1)}(4,44528) = -15,32448046$$

$$\phi^{(1)}(9,87714) = -7,22443617$$

$$\phi^{(1)}(7) = -15,19$$

$$\phi^{(1)}(10,25136) = -5,67$$

para el paso $\Delta_i = \Delta$ se tiene

$$\Delta = \frac{11,34 - (0)}{(7 + 1)} = 1,4175$$

Normalizando la función $\phi^{(1)}$ se tiene:

$$\phi_n^{(1)}(0,81648) = -0,1382592$$

$$\phi_n^{(1)}(0,13608) = -0,02453305$$

$$\phi_n^{(1)}(2,35872) = -0,34088043$$

$$\phi_n^{(1)}(4,44528) = -0,4931774$$

$$\phi_n^{(1)}(9,87714) = -0,2325$$

$$\phi_n^{(1)}(7) = -0,48884955$$

$$\phi_n^{(1)}(10,25136) = -0,1824738$$

la siguiente figura muestra el gráfico $\phi_n^{(1)}(x)$ vs x para los resultados obtenidos.

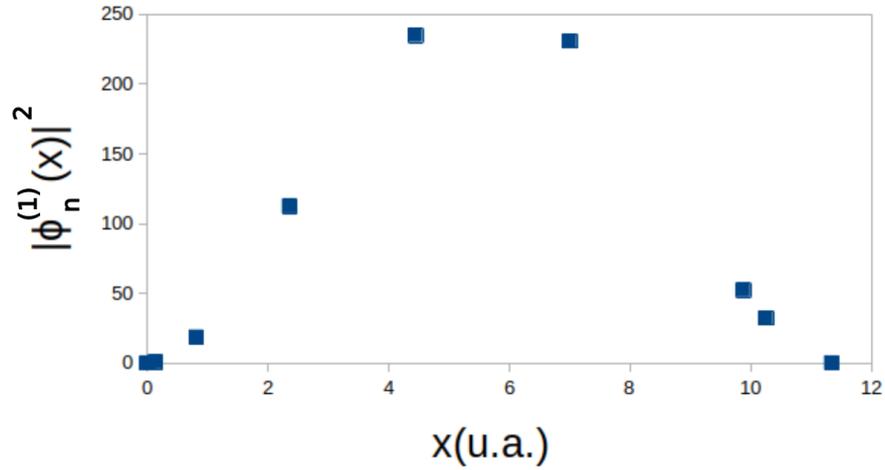
Paso 3.- Valor propio $\lambda^{(1)}$ del estado fundamental en primera aproximación.

En primera aproximación, para el potencial de Airy,

$$\frac{d^2 \phi(x)_n^{(1)}}{dx^2} = (0,04x + \lambda^{(1)})\phi(x)_n^{(1)}$$

Por lo tanto en segunda aproximación,

Figura 26: Cuadrado de la función de onda del estado fundamental para el potencial de Airy en primera aproximación, usando el método de Green Monte Carlo para 7 puntos aleatorios con los puntos extremos fijos.



$$\phi^{(2)}(h) = \int G(x, h)(0, 04x + \lambda^{(1)})\phi_n^{(1)}(x)dx$$

Aproximamos la integral por una sumatoria. Entonces,

$$\phi^{(2)}(h) = \sum_x G(x, h)(0, 04x + \lambda^{(1)})\phi_n^{(1)}(x)\Delta \quad (4.3)$$

Para realizar este cálculo se necesitan dos conjuntos de números aleatorios, el conjunto de los x_i y el conjunto de los h_j .

El conjunto de los x_i es el usado para construir $\phi_n^{(1)}$. El conjunto de los h_j debe generarse de manera aleatoria, los cuales pueden ser (como ejemplo):

$$h_j = \{0, 13608; 1, 08864; 2, 18862; 3, 19788; 5, 17104; 7, 7679; 9, 5823\}$$

Los valores de $G(x, h)$ deben calcularse para todas las combinaciones de los x_i y los h_j usando

2.53 y luego junto con los valores hallados para $\phi^{(1)}$ se calcula $\phi^{(2)}$ usando 4.3. Los resultados obtenidos para $\phi^{(2)}$ son:

$$\phi^{(2)}(0,13608) = 0,03 + 0,184593757\lambda^{(1)}$$

$$\phi^{(2)}(1,08864) = 0,236537249 + 1,390285635\lambda^{(1)}$$

$$\phi^{(2)}(2,18862) = 0,4702320527 + 2,62859583\lambda^{(1)}$$

$$\phi^{(2)}(3,19788) = 0,646396752 + 3,3592853\lambda^{(1)}$$

$$\phi^{(2)}(5,17104) = 0,8854504 + 4,12\lambda^{(1)}$$

$$\phi^{(2)}(7,7679) = 0,846666029 + 3,440017\lambda^{(1)}$$

$$\phi^{(2)}(9,5823) = 0,5721625054 + 2,081065916\lambda^{(1)}$$

La condición de normalización permite encontrar $\lambda^{(1)}$:

$$\lambda^{(1)} = -0,3272605429$$

Usando este valor de lambda se puede encontrar $\phi^{(2)}(h_j)$ y de aquí $\phi_n^{(2)}(h_j)$. Los resultados obtenidos son,

$$\phi_n^{(2)}(0,13608) = -0,03041025$$

$$\phi_n^{(2)}(1,08864) = -0,21844838$$

$$\phi_n^{(2)}(2,18862) = -0,39$$

$$\phi_n^{(2)}(3,19788) = -0,45296478$$

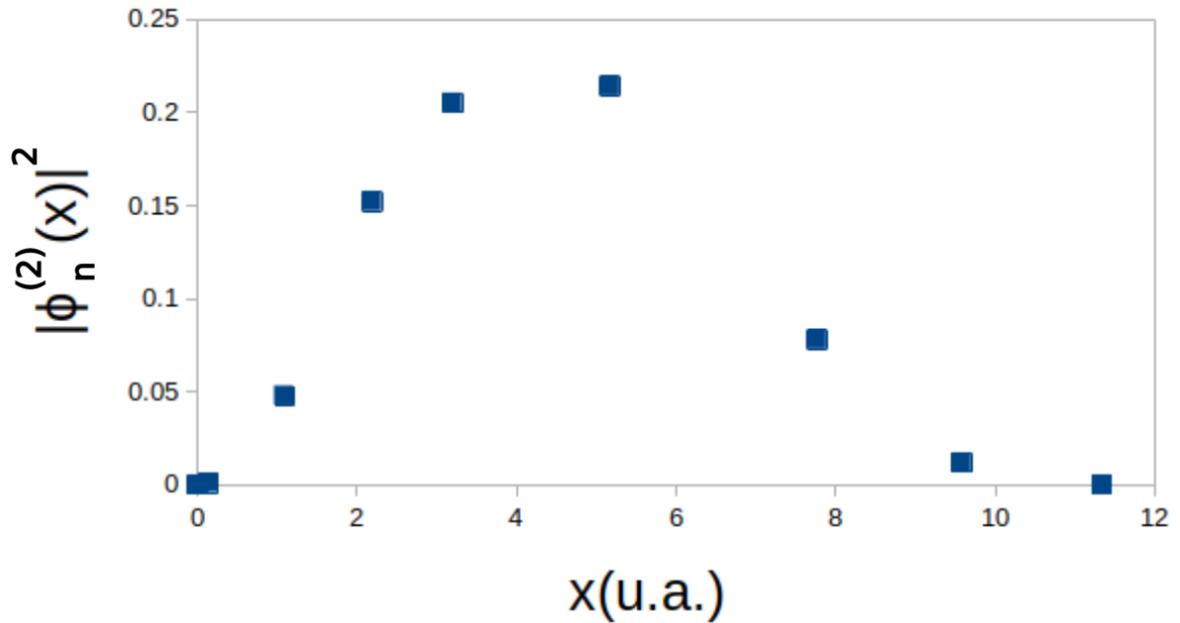
$$\phi_n^{(2)}(5,17104) = -0,462863036$$

$$\phi_n^{(2)}(7,7679) = -0,279116064$$

$$\phi_n^{(2)}(9,5823) = -0,108888256$$

la siguiente figura muestra el gráfico $\phi_n^{(2)}(x)$ vs x para los resultados obtenidos.

Figura 27: Cuadrado de la función de onda del estado fundamental para el potencial de Airy en segunda aproximación, usando el método de Green Monte Carlo para 7 puntos aleatorios con los puntos extremos fijos.



Cálculo usando 500 puntos

Usando el método Green-Monte Carlo se cálculo la energía del estado fundamental y su correspondiente función de onda para el potencial de Airy usando 50 puntos y 500 puntos entre 0 y 15 u.a..

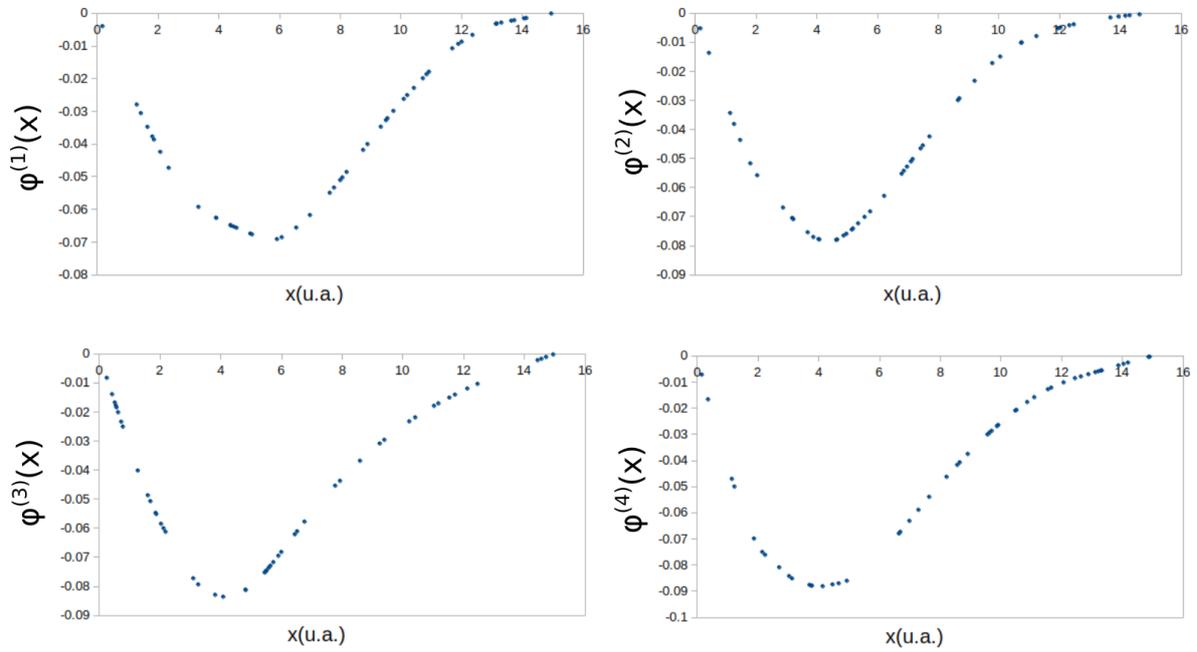
En el caso de 50 puntos, en la figura 28 se muestra los resultados para las cuatro primeras aproximaciones.

Para el cálculo con 500 puntos entre 0 y 15 u.a., el criterio para terminar un cálculo fue que la diferencia entre $\lambda^{(n+1)}$ y $\lambda^{(n)}$ (para la n-ésima aproximación) sea menor o igual que 0,01.

Se obtuvo una convergencia luego de 33 iteraciones.

El cálculo obtenido para la energía del estado fundamental es:

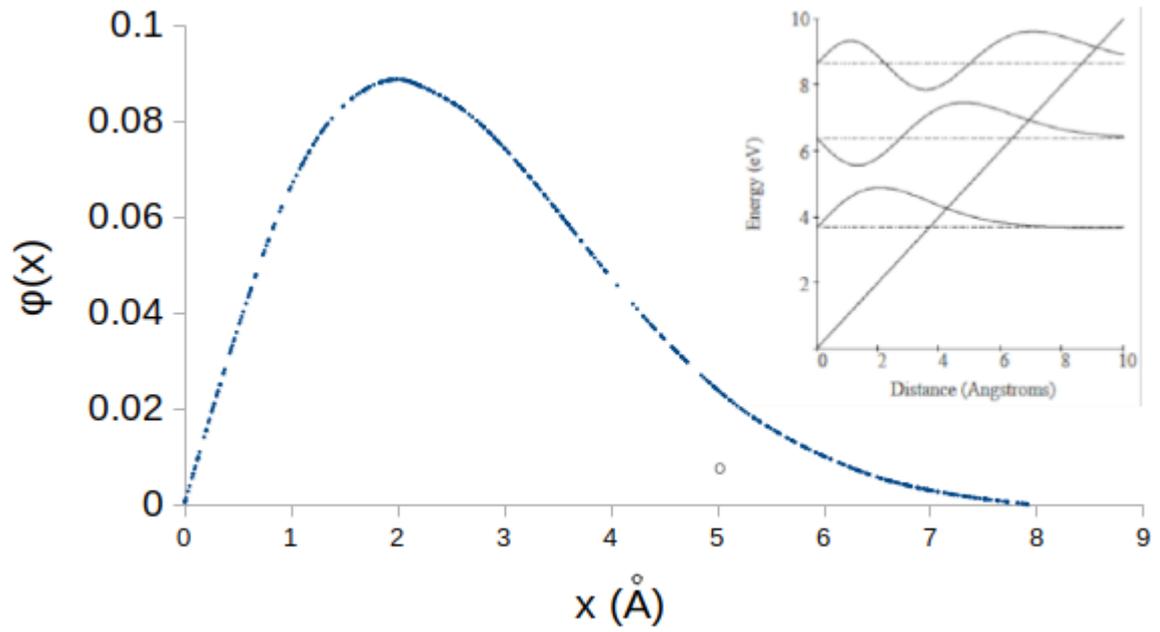
Figura 28: Función de onda para el estado fundamental de una partícula en el Potencial de Airy calculada usando el Método Green Monte Carlo, considerando 50 puntos entre 0 y 15 u.a.



$$\lambda = -0,276038 \text{ u.a.},$$

por lo que la energía correspondiente es $E = 0,138u.a.$ La función de onda calculada se muestra en la figura 29.

Figura 29: Resultado obtenido para el estado fundamental $\phi(x)$ de una partícula en el potencial de Airy considerando 500 puntos. La figura insertada muestra el resultado obtenido para $\phi(x)$ obtenido de **Gilbert-1991**



Conclusiones

El método aproximado de la función de Green, así como el método Green Monte Carlo son métodos iterativos que permiten abordar problemas relacionados con la ecuación de Schrödinger de una manera efectiva como se pudo comprobar al abordar los problemas sencillos del pozo infinito, el problema del oscilador armónico simple así como el problema del átomo de Hidrógeno y el potencial de Airy.

Los resultados obtenidos son satisfactorios tanto para hallar la función de onda del estado fundamental del sistema, así como para hallar la energía de este estado.

Los resultados de las funciones de onda y el cálculo de la energía para los estados fundamentales hallados al usar el método de Green y el método Green Monte Carlo son muy similares, lo que permitirá abordar problemas más complejos en los cuales debe usarse el método Green Monte Carlo ya que este método permite calcular con mayor precisión integrales de funciones con cambios pronunciados al variar su argumento.

Los resultados obtenidos dan autofunciones similares a los resultados teóricos para los dos métodos usados. Los autovalores obtenidos de 1,23 u.a., $\omega/2$ u.a. y -0,5 u.a. para el pozo infinito, el oscilador armónico simple y el átomo de Hidrógeno respectivamente usando el método Green Monte Carlo son similares a los valores teóricos.

Los cálculos son bastante confiables, lo que justifica su uso en problemas más complicados.

Referencias Bibliográficas

- Binder, K. y col. (2012). *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Topics in Current Physics. Springer Berlin Heidelberg. ISBN: 9783642828034. URL: <https://books.google.com.pe/books?id=nmfmCAAQBAJ>.
- Butkov, E. (1971). *Mathematical Physics*. Addison-Wesley series in advanced physics. URL: https://books.google.com.pe/books?id=E_YNzQEACAAJ.
- Carol A. Traynor, Anderson y Boghosian (1991). «A quantum Monte Carlo calculation of the ground state energy of the hydrogen molecule». En: *J. Chem. Phys.* 94.5, págs. 2802-2805.
- Chen, Bin y James B. Anderson (feb. de 1995). «Improved quantum Monte Carlo calculation of the ground-state energy of the hydrogen molecule». En: *The Journal of Chemical Physics* 102.7, págs. 2802-2805. ISSN: 0021-9606. DOI: 10.1063/1.468656. eprint: https://pubs.aip.org/aip/jcp/article-pdf/102/7/2802/19102546/2802_1_online.pdf. URL: <https://doi.org/10.1063/1.468656>.
- Cohen-Tannoudji, C., B. Diu y F. Laloë (1977). *Quantum Mechanics*. A Wiley - Interscience publication v. 1. Wiley. ISBN: 9782705658335. URL: <https://books.google.com.pe/books?id=iHcpAQAAMAAJ>.
- Valqui, Holger (1996). «Construcción de las funciones de Green caso unidimensional». En: *REVCIUNI* 2.3, págs. 1314-1342.

Anexos

	Pág.
Anexo 1. Demostración de la ecuación 1.8	1
Anexo 2. Unidades atómicas (u.a.)	2

Anexo 1. Demostración de la ecuación 1.8

En este apéndice demostraremos la ecuación 1.8. De 1.6 se tiene:

$$\rho(x, h) = \mathcal{T}(x)[G(x, h)(\mathcal{D}u(x)) - u(x)(\mathcal{D}G(x, h))]$$

Derivando y operando esta ecuación,

$$\begin{aligned} \mathcal{D}\rho(x, h) &= \mathcal{D}[(\mathcal{T}G)\mathcal{D}u(x) - (\mathcal{T}u)\mathcal{D}G(x, h)] = \mathcal{D}(\mathcal{T}(x)G(x, h))\mathcal{D}u(x) + \\ &\quad \mathcal{T}(x)G(x, h)\mathcal{D}^2u(x) - [\mathcal{D}(\mathcal{T}(x)u(x))\mathcal{D}G(x, h) + \mathcal{T}(x)u(x)\mathcal{D}^2G(x, h)] \\ &= \mathcal{D}\mathcal{T}(x)G(x, h)\mathcal{D}u(x) + \mathcal{T}(x)\mathcal{D}G(x, h)\mathcal{D}u(x) + \mathcal{T}(x)G(x, h)\mathcal{D}^2u(x) \\ &\quad - \mathcal{D}\mathcal{T}(x)u(x)\mathcal{D}G(x, h) - \mathcal{T}(x)\mathcal{D}u(x)\mathcal{D}G(x, h) - \mathcal{T}(x)u(x)\mathcal{D}^2G(x, h) \\ &= \mathcal{D}\mathcal{T}(x)G(x, h)\mathcal{D}u(x) - \mathcal{D}\mathcal{T}(x)u(x)\mathcal{D}G(x, h) + \mathcal{T}(x)G(x, h)\mathcal{D}^2u(x) \\ &\quad - \mathcal{T}(x)u(x)\mathcal{D}^2G(x, h) \\ &= \mathcal{D}\mathcal{T}(x)\mathcal{D}u(x)G(x, h) + \mathcal{T}(x)\mathcal{D}^2u(x)G(x, h) - (\mathcal{D}\mathcal{T}(x)\mathcal{D}G(x, h)u(x) \\ &\quad + \mathcal{T}(x)\mathcal{D}^2G(x, h)u(x)) \\ &= [\mathcal{D}(\mathcal{T}\mathcal{D})u(x)]G(x, h) - [\mathcal{D}(\mathcal{T}\mathcal{D})G(x, h)]u(x) \\ &= [\mathcal{D}(\mathcal{T}\mathcal{D}) + q]u(x)G(x, h) - [\mathcal{D}(\mathcal{T}\mathcal{D}) + q]G(x, h)u(x) \end{aligned}$$

Donde en la última ecuación q se define como en 1.4. Si $\mathcal{L} = \mathcal{D}(\mathcal{T}\mathcal{D}) + q$, entonces se tiene la ecuación 1.8: $\mathcal{D}\rho(x, h) = \mathcal{L}u(x)G(x, h) - \mathcal{L}G(x, h)u(x)$.

Anexo 2. Unidades atómicas (u.a.)

Tabla B-1. Unidades Atómicas Fundamentales.

Unidades Atómicas Fundamentales.

Magnitud	Nombre	Símbolo	Valor en el SI	Valor en unidades atómicas
Longitud	Radio de Bohr	a_0	$5.291\,772\,108(18) \times 10^{-11}$ m	1
Masa	Masa del electrón en reposo	m_e	$9.109\,3826(16) \times 10^{-31}$ kg	1
Carga	Carga elemental	e	$1.602\,176\,53(14) \times 10^{-19}$ C	1
Momento angular	Constante de Planck	\hbar	$1.054\,571\,68(18) \times 10^{-34}$ J s	1
Constante eléctrica ⁻¹	Constante de fuerza de Coulomb	$\frac{1}{4\pi\epsilon_0}$	8.987×10^9 kg·m ³ ·s ⁻² ·C	1
Energía		$\frac{e^2}{a_0}$	4.3592×10^{-4} J	1

También es útil la siguientes equivalencia:

$$1eV = 0,0367502 \text{ u.a.}$$