

# SIMULACIÓN E IMPLEMENTACIÓN DE LA ECUACIÓN DE SCHROEDINGER APLICADO AL OSCILADOR ARMÓNICO Y LOS POZOS DE POTENCIAL

**Dr. Werner Pacheco Lujan, Mg. Sc. Luis Milla, Ing. Marco Enciso**  
d260051@unmsm.edu.pe

*Facultad de Ingeniería Electrónica de la Universidad Nacional Mayor de  
San Marcos de Lima - Perú*

**Resumen:** En este trabajo se demuestra primero teóricamente mediante la ecuación de Schroedinger la probabilidad de encontrar la partícula en una elongación dada; tanto en el caso del oscilador armónico como en el pozo de potencial. Luego se simula ambos procesos para encontrar sus gráficas de la probabilidad versus elongación.

**Abstract:** In this work we demonstrate, first theoretically through the Schroedinger equation the probability of founding the particle in one determinate elongation; both in the case of the armonic oscillator as in the potential well. After this we do both simulati6n process for obter their gráficas of the probability versus elongation.

**Palabras Claves:** Ecuación Schroedinger, Sistema, partícula única.

## I. INTRODUCCION

La ecuación de Schroedinger de amplitud [Brandt, H.D. Dahmen "Ecuación de Schroedinger pozos unidimensionales cap. 3"]: 
$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - E_p)\Psi = 0 \quad (1)$$

Permite predecir a nivel cuántico la probabilidad de encontrar una partícula simple en este caso el electr6n, para cada posici6n que pueda ocupar en el espacio. Así si la Física clásica establece zonas prohibidas que de ninguna manera el electr6n puede ocupar, la ecuaci6n de Schroedinger establece que hay cierta probabilidad si bien pequeña de encontrar el electr6n en zonas establecidas de prohibidas por la Física clásica, esto ya fue comprobado experimentalmente y por ello la importancia de la ecuaci6n de Schroedinger.

En el caso del oscilador arm6nico la Física clásica establece la imposibilidad de que el electr6n se encuentre más allá de la elongaci6n  $x = a$ , sin embargo la ecuaci6n de Schroedinger para este caso establece que hay una pequeña probabilidad de encontrar lo más allá de  $x = a$ , como se ve en la Fig. 2 obtenida mediante simulaci6n con el software Simnon o con el Spice, esto mismo se puede verificar en el laboratorio implementando la obtenci6n de  $\Psi$

de la ecuación de Schroedinger mediante el esquema de la Fig. 6. Lo mismo se puede conseguir para el caso del pozo de potencial con esquemas de la Fig. 7, fig. 8 y Fig. 9.

### 2.1 Material y Métodos

Para la simulación del comportamiento del sistema de partícula única, se usa el Software de Simulación Simnon y el Spice, esto se puede contrastar con lo que se obtiene en laboratorio implementando la obtención de la variable  $\Psi$  de la ecuación de Schroedinger mediante circuitos que hacen uso de diversos circuitos integrados: multiplicadores, sumadores y operacionales.

### 2.2 Ecuación de Onda Electromagnética

La teoría electromagnética [Allen Nussbaum – “Electromagnetic and Quantum Properties of Materials” Prentice – Hall, Inc. 1966] establece la ecuación de una onda si H es la intensidad de campo magnético de la onda y solo consideramos el desplazamiento según el eje X tenemos:

$$\frac{\partial^2 H}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 H}{\partial t^2} \quad (2)$$

La solución de la ecuación (2) es:

$$E = A e^{i(Kx - \omega t)} \quad (3)$$

donde

$$\begin{cases} \omega = 2\pi\nu \\ \nu = \omega / 2\pi \\ K = 2\pi / \lambda \quad \lambda = 2\pi / K \end{cases}$$

Para una magnitud de la onda cualquiera en forma genérica la llamamos y

$$y = A e^{i(Kx - \omega t)} \quad (4)$$

### 2.3 Onda de Debroglie

Eisten estableció la ecuación de energía producida por la masa (m) transformada en energía.

$$E = mc^2 = h\nu \quad (5)$$

E corresponde a la energía total

En el caso de un fotón o partícula cualquiera (por ejemplo el electrón) en movimiento y completamente libre, E será igual a la energía cinética únicamente. Pero si la partícula esta confinada E será igual a la energía cinética más la energía potencial  $E = T + E_p$ .

Debroglie [Allen Nussbaum – “Electromagnetic and Quantum Properties of Materials” Prentice – Hall, Inc.1966, Mac Kelvin “Física del Estado Sólido de Semiconductores”] establece la ecuación de la cantidad de movimiento no solo para el fotón, sino que también para cualquier partícula por ejemplo el electrón.

$$p = mc = \frac{mcc}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \frac{1}{T} \quad (6)$$

donde m es la masa del electrón y c es la velocidad de la luz

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (7)$$

donde la h es la constante de Plank

$$\text{Si } \hbar = h / 2\pi$$

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi / K} = K\hbar \rightarrow K = p / \hbar \quad (8)$$

$$E = h\nu = h \frac{\omega}{2\pi} = \omega\hbar \rightarrow \omega = E / \hbar \quad (9)$$

reemplazando k y  $\omega$  de las ecuaciones (8) y (9) en la ecuación (4) tenemos

$$y = Ae^{i(px-Et)/\hbar} \quad (10)$$

Reemplazamos y por  $\Psi$  porque la ecuación (10) se refiere a la onda partícula e y corresponde a la de amplitud instantánea de la onda pero por ser compleja no tiene por el momento interpretación física así:

$$\Psi = ae^{i(px-Et)/\hbar} \quad (11)$$

### III. ECUACION DE SCHRODINGER DEPENDIENTE DEL TIEMPO

La ecuación de Schroedinger dependiente del tiempo [Allen Nussbaum – “Electromagnetic and Quantum Properties of Materials” Prentice Hall, Inc. 1966], ecuación diferencial que gobierna el movimiento de un electrón es:

$$\frac{-\hbar^2 \partial^2 \Psi}{2m \partial x^2} + E_p \Psi - i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = 0 \quad (12)$$

donde  $\Psi$  es una función del desplazamiento  $x$  y del tiempo  $t$

$$\text{Si } \Psi(x,t) = \psi(x)T(t)$$

Reemplazando en ecuación (12) y separando variables

$$\frac{-\hbar^2 \frac{d^2 \psi}{dx^2}}{2m \psi} + E_p = \frac{i\hbar}{T} \frac{dT}{dt} = C \quad (13)$$

La ecuación de la derecha en ecuación (13) es solo función del tiempo

$$\frac{dT}{dt} - \frac{C}{i\hbar} T = 0 \quad (14)$$

La solución de la ecuación (14) es:

$$T = e^{(C / i\hbar)t} \quad (15)$$

La ecuación (11) tiene 2 productos uno dependiente de  $x$  y otro dependiente del tiempo, el factor dependiente del tiempo es:

$$\Psi(x,t) = \psi(x) e^{-iE / \hbar} \quad (16)$$

igualando ecuación (15) con ecuación (16) se llega a la conclusión de que

$$C = E$$

La parte izquierda de la ecuación (13) en que se ha reemplazado  $C$  por  $E$  es:

$$\frac{-\hbar^2}{2m \psi} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + E_p = E \quad (17)$$

operando

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + E_p \psi = E \psi \quad (18)$$

Lo que me lleva despejando a la Ecuación de Schrodinger de amplitud:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - E_p) \psi = 0 \quad (19)$$

La solución  $\Psi$  de esta ecuación es llamada función onda

**Oscilador Armónico** [Allen Nussbaum – “Electromagnetic and Quantum Properties of Materials” Prentice – Hall, Inc. 1966]

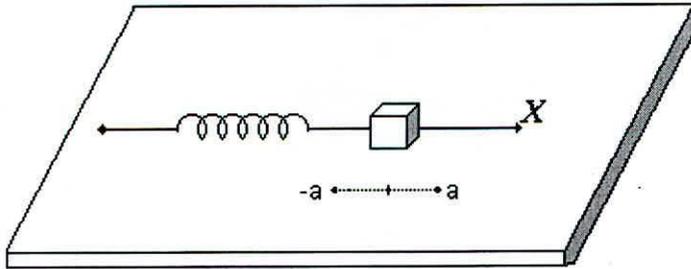


Fig. 1 Movimiento del oscilador clásico

En un resorte por la ley de Hook la fuerza de reacción del resorte es proporcional a la elongación:

$$F = -Kx \quad (20)$$

De acuerdo a la primera ley de Newton en un movimiento acelerado:

$$F = \frac{md^2x}{dt^2} = -Kx \quad (20)$$

Operando

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{K}{m}x = 0 \quad (21)$$

$$Si \omega^2 = \frac{k}{m}$$

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \omega^2 x = 0 \quad (22)$$

la solución de la ecuación diferencial (22) es:

$$x = A \cos(\omega t + \beta) \quad (23)$$

que es la solución del oscilador clásico

### Oscilador Cuántico

En un resorte la energía potencial [Allen Nussbaum – “Electromagnetic and Quantum Properties of Materials” Prentice Hall, Inc. 1966] es:

$$E_p = -\int F dx = Kx^2 \quad (24)$$

sustituyendo en la ecuación (19) el valor de  $E_p$  dado en la ecuación (24)

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{Kx^2}{2} \right) \psi = 0 \quad (25)$$

$$\text{Si} \left\{ a = \frac{2mE}{\hbar^2} \text{ y } \beta^2 = \frac{mK}{\hbar^2} \right.$$

$$\left. \frac{d^2 \psi}{dx^2} + (a - \beta^2 x^2) \psi = 0 \quad (26) \right.$$

$$\text{SI } a = \beta$$

la solución de la ecuación (26) es:

$$\psi = e^{-\beta x^2 / 2} \quad (27)$$

La solución más general de la ecuación (26) es

$$\psi(x) = e^{-\beta x^2 / 2} f(x) \quad (28)$$

donde  $f(x)$  es la solución de

$$\frac{d^2 f}{dx^2} - 2\beta x \frac{df}{dx} + (a - \beta)f = 0 \quad \text{que es la ecuación de Legendre} \quad (29)$$

Esta ecuación diferencial se ha obtenido al introducir la ecuación (28) en la ecuación diferencial de Legendre y tiene infinitas soluciones. Las soluciones son series de potencias con  $n$  términos, cuando  $n = 0$  la solución es solo una constante

$$\begin{aligned} f_0(x) &= 1 & \text{Si } a &= \beta \\ f_1(x) &= x & \text{Si } a &= 3\beta \\ f_2(x) &= 2\beta x^2 - 1 & \text{Si } a &= 5\beta \end{aligned}$$

$$f_{10}(x) = \frac{6.4}{189}\beta^5 x^{10} - \frac{16}{21}\beta^4 x^8 + \frac{16}{3}\beta^3 x^6 - \frac{40}{3}\beta^2 x^4 - 10\beta x^2 - 1 \quad \text{Si } \alpha = (2 \times 10 + 1)\beta = 21\beta$$

Para  $\alpha = \beta$

$$\alpha = \frac{2mE}{\hbar^2} = \beta = \frac{\sqrt{mK}}{\hbar^2} = \frac{\sqrt{mK}}{h}$$

$$E = \frac{\sqrt{mK}}{2m} \hbar = \frac{\hbar}{2} \sqrt{K/m} = \frac{\hbar \omega}{2} = \frac{\hbar 2\pi\nu}{2\pi 2}$$

$$E = \frac{\hbar \nu}{2} \quad (30)$$

Que es el mínimo valor de energía que tiene el oscilador

para  $\alpha = 3\beta \rightarrow E = \frac{3\hbar \nu}{2}$

la energía ha aumentado en un escalón igual a  $h\nu$

para  $\alpha = 5\beta \rightarrow E = \frac{5\hbar \nu}{2}$  la energía ha aumentado en  $h\nu$

para  $\alpha = 2n+1 \rightarrow E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar \nu \quad (n = 0, 1, 2, \dots, n)$

$$\psi(x) = e^{-\beta x^2/2} f(x)$$

$$\psi_0(x) = \text{Exp} \frac{(-\beta x^2)}{2}$$

$$\psi_1(x) = \text{Exp} \frac{(-\beta x^2)^*}{2} x$$

$$\psi_2(x) = \text{Exp} \frac{(-\beta x^2)^*}{2} (2\beta x^2 - 1)$$

$$\psi_{10}(x) = \text{Exp} \frac{(-\beta x^2)^*}{2} \left[ \frac{6.4}{189} \beta^5 x^{10} - \frac{16}{21} \beta^4 x^8 + \frac{16}{3} \beta^3 x^6 - \frac{40}{3} \beta^2 x^4 - 10 \beta x^2 - 1 \right] \quad (31)$$

El máximo recorrido del oscilador según el eje x es  $x = a$ , en ese instante la energía es solamente potencial e igual a:

$$E = K \frac{a^2}{2} \rightarrow a = \sqrt{2E / K} \quad (32)$$

Se Demuestra que  $a = (21 h / 4 \pi^2 m v)^{1/2}$  (33)

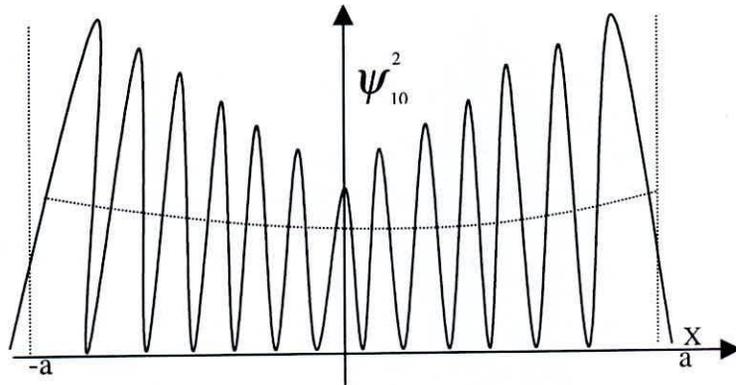


Fig. 2. Valor cuadrático de la probabilidad  $\psi$  de encontrar el electrón en la elongación  $x$  para el oscilador armónico cuántico.

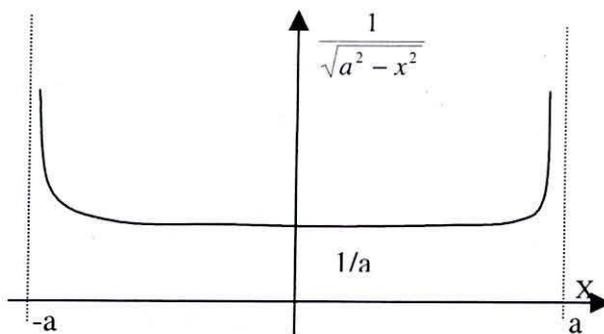


Fig. 3 La curva de la posición probable del oscilador armónico clásico

La probabilidad  $dp$  de encontrar la masa  $m$  en un pequeño intervalo  $dx$  localizada a una distancia  $x$  del origen es:

$$dp \propto \frac{dx}{v} = \frac{dx}{dx/dt}$$

ya que en el oscilador clásico  $x = a \cos \omega t$  tenemos

$$v = \frac{dx}{dt} = \frac{d(a \cos \omega t)}{dt} = -\omega a \sin \omega t = -\omega a \sqrt{1 - \cos^2 \omega t}$$

$$v = \omega \sqrt{a^2 - x^2} \quad (34)$$

El diferencial de probabilidad es proporcional a

$$dp = \frac{1}{\sqrt{a^2 - x^2}} \quad (35)$$

Una comparación de las fig. 2 y fig. 3 muestra que hay una cercana semejanza entre la curva de probabilidad de la clásica masa vibrante y la curva promedio de  $\psi_{10}^2$ . Es razonable postular que  $\psi_n^2(x)$  es la probabilidad por unidad

de longitud de encontrar un oscilador de energía  $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu$  en una pequeña longitud  $dx$  localizada en  $x$ .

Esta cantidad es también llamada la densidad de probabilidad. Se ve en la figura 2 que hay una pequeña probabilidad de encontrar la partícula en lugares que no son accesibles a la física clásica, ósea más allá de  $x = \pm a$

### Pozo Potencial

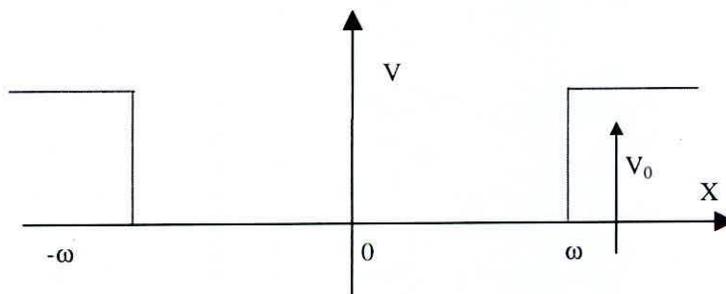


Fig. 4 Pozo de Potencial rectangular de ancho  $2\omega$  y profundidad  $V_0$

El pozo de potencial [Brandt, H.D. Dahmen "Ecuación de Schroedinger pozos unidimensionales cap. 3"] rectangular es mostrado en la Fig. 4, la dependencia del potencial  $v$  respecto a  $x$  es:

$$V_0 \quad \text{Para} \quad x \leq -\omega \quad \frac{d^2 \psi_e}{dx^2} - \beta^2 \psi_e = 0 \quad (x \leq -\omega) \quad (36)$$

$$0 \quad \text{Para} \quad -\omega \leq x \leq \omega \quad \frac{d^2 \psi_c}{dx^2} + \beta^2 \psi_c = 0 \quad (x \leq -\omega) \quad (37)$$

$$V_0 \quad \text{Para} \quad x \geq \omega \quad \frac{d^2 \psi_r}{dx^2} - \beta^2 \psi_r = 0 \quad (x \geq -\omega) \quad (38)$$

$$\text{Donde } \beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \quad (39) \quad ; \quad a = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (40)$$

Las soluciones de las tres ecuaciones diferenciales son:

$$\psi_l = Ae^{\beta x} + Be^{-\beta x} \quad \text{Para} \quad x \leq -\omega \quad (41)$$

$$\psi_c = C \sin \beta x + D \cos \alpha x \quad \text{Para} \quad -\omega \leq x \leq \omega \quad (42)$$

$$\psi_r = Ee^{\beta x} + Fe^{-\beta x} \quad \text{Para} \quad x \geq \omega \quad (43)$$

Si  $x \rightarrow \infty$   $\psi_r$  que contiene el término  $Ee^{\beta x}$  sería muy grande en el  $\infty$  lo cual no puede ser por lo que se concluye que  $E$  debe ser cero. Un argumento similar para el lado izquierdo da  $B = 0$

Aplicando condiciones de contorno en  $x = -\omega$

$$\psi_l(-\omega) = \psi_c(-\omega)$$

$$\frac{d\psi_l(-\omega)}{dx} = \frac{d\psi_c(-\omega)}{dx} \quad (44)$$

Aplicando condiciones de contorno en  $x = \omega$

$$\psi_r(\omega) = \psi_c(\omega)$$

$$\frac{d\psi_r(\omega)}{dx} = \frac{d\psi_c(\omega)}{dx} \quad (45)$$

Se obtiene las ecuaciones homogéneas

$$Ae^{-\beta\omega} + C \sin \alpha\omega - D \cos \alpha\omega = 0 \quad (46)$$

$$\beta Ae^{-\beta\omega} - \alpha C \cos \alpha\omega - \alpha D \sin \alpha\omega = 0 \quad (47)$$

$$C \sin \alpha\omega + D \cos \alpha\omega - Fe^{-\beta\omega} = 0 \quad (48)$$

$$\alpha C \cos \alpha\omega - \alpha D \sin \alpha\omega + \beta Fe^{-\beta\omega} = 0 \quad (49)$$

Estas ecuaciones tienen una única solución si el determinante de los coeficientes es cero.

Se llega a las condiciones

$$\tan \alpha\omega = \frac{\beta}{\alpha} \rightarrow \alpha\omega \tan \alpha\omega = \beta\omega \quad (50)$$

$$\cot \alpha\omega = \frac{-\beta}{\alpha} \rightarrow -\alpha\omega \cot \alpha\omega = \beta\omega \quad (51)$$

Estas ecuaciones trascendentales (50) y (51) no pueden ser resueltas analíticamente para encontrar  $\alpha$  y  $\beta$  o  $\beta\omega$  y  $\alpha\omega$ . Pero puede ser resuelto gráficamente mediante la ecuación de un círculo:

$$\alpha^2 \omega^2 + \beta^2 \omega^2 = \frac{2mV_0\omega^2}{\hbar^2} \quad (52)$$

La intersección de este círculo ec. (52) con las curvas de ecs; (50) y (51) son los únicos valores de  $\alpha$  y  $\beta$  que satisfacen ambos; las definiciones de  $\alpha^2$ ,  $\beta^2$  y las condiciones de contorno.

La Fig. 5 muestra las curvas usando como valor:

$2mV_0\omega^2/\hbar^2 = 36$ . Habiendo encontrado  $\alpha\omega$  y  $\beta\omega$  podemos determinar los correspondientes valores de E.

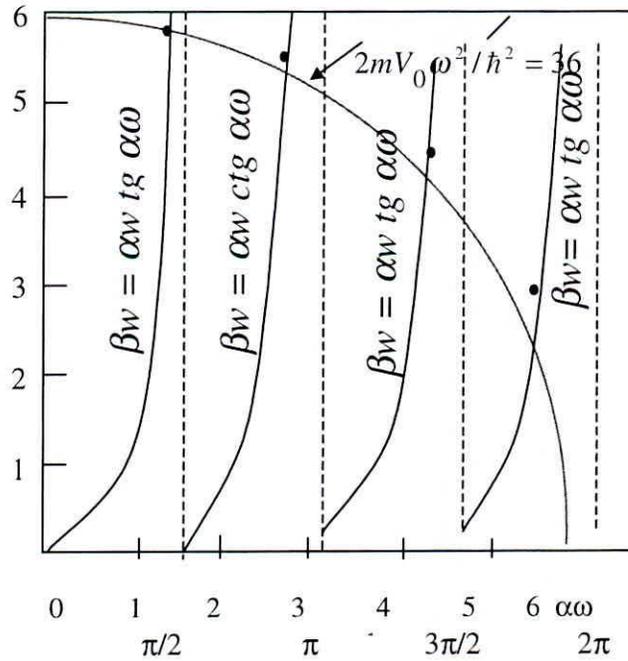


Fig. 5 Determinación gráfica de los niveles de energía para el pozo rectangular

La implementación en el Laboratorio para obtener  $\psi$  dado por la ecuación de Schroedinger se realiza con multiplicadores sumadores y operacionales.

#### IV. CONCLUSIONES

Los resultados mediante Simulación hechos con el Simmon y el Spice, permiten concordar con lo que establece la Ecuación de Schroedinger, para el comportamiento del Oscilador armónico y para el Pozo de Potencial. Queda pendiente para un trabajo posterior la implementación en Laboratorio de la ecuación de Schroedinger.

#### V. REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- Allen Nussbaum – “*Electromagnetic and Quantum Properties of Materials*” Prentice – Hall, Inc. 1966  
 Brandt, H. D. Dahmen “*Ecuación de Schroedinger pozos unidimensionales cap. 3*”  
 Mac Kelvin “*Física del Estado Sólido de Semiconductores*”