
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE
MÉXICO
Grado en Física

MÉTODOS DE CÓMPUTO PARA MODELAR
SISTEMAS ATÓMICOS CONFINADOS EN
COORDENADAS CILÍNDRICAS

Tesis

Roberto Áxel Román Morales

Director de Tesis:
Dr. Ricardo Méndez Fragoso



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Cuando leemos demasiado deprisa
o demasiado despacio, no
entendemos nada

Blaise Pascal

Agradecimientos

A mis padres Roberto y Socorro cuya confianza, paciencia, comprensión y apoyo han sido indispensables para alcanzar mis metas.

A mis hermanos Astrid e Ivan que siempre me han apoyado de una u otra forma.

A mis abuelas Noe y Luz, quienes me cuidaron y criaron en distintas etapas de mi vida.

A mis tías y primos, que han sido parte vida.

Al Dr. Ricardo Méndez Fragoso quien asesoro y atendió mis dudas a lo largo de todo este trabajo.

Y a la UNAM por haberme brindado los medios necesarios para mi desarrollo académico y personal.

Se agradece el apoyo otorgado por los proyectos DGAPA PAPIME PE-108216, PE-105017 y PAPIIT IA 105516 para la elaboración de este trabajo.

Índice general

1. Introducción.	1
1.1. Sistemas cuánticos confinados	1
1.2. Modelos de sistemas asimétricos.	1
1.3. Estructura del trabajo	2
2. Ecuación de Helmholtz en una dimensión	5
2.1. Soluciones analíticas	5
2.2. Discretización de la función	6
2.3. Comparación de resultados de las condiciones a la frontera	10
2.3.1. Condiciones tipo Dirichlet	10
2.3.2. Condiciones tipo Neumann-Dirichlet	15
2.3.3. Condiciones cíclicas	19
3. Ecuación de Helmholtz en dos dimensiones con geometría circular	25
3.1. Solución analítica	25
3.2. Solución numérica	28
3.3. Comparación entre soluciones analíticas y numéricas	32
4. Ecuación de Helmholtz en coordenadas polares	37
4.1. Discretización de la coordenada radial y angular	37
4.2. Comparación entre soluciones analíticas y numéricas	43
5. Aplicaciones del tratamiento numérico en una dimensión	47
5.1. Oscilador armónico	47
5.2. Oscilador armónico truncado	54
5.3. Potencial escalón	56
5.4. Oscilador armónico-uniforme	62
5.5. Oscilador armónico truncado asimétrico	64
6. Aplicaciones del tratamiento numérico en dos dimensiones	67

ÍNDICE GENERAL

6.1. Oscilador armónico en 2 dimensiones	67
6.2. Oscilador armónico truncado	74
6.3. Potencial asimétrico en un cuadrante	78
6.4. Oscilador armónico truncado asimétrico	81
7. Resultados y conclusiones	85
7.1. Resultados	85
7.2. Conclusiones	86
7.3. Trabajo futuro	87
A. Comparación de tiempos de cálculo	89
B. Matrices de Householder y eigenvalores de una matriz tridiagonal	91
C. Programas de computo realizados	95
Bibliografía	97

Introducción.

1.1. Sistemas cuánticos confinados

El desarrollo de materiales con dimensiones relativamente pequeñas ha vuelto necesario entender las propiedades físicas de distintos sistemas cuánticos sujetos a ciertas constricciones espaciales. Se ha encontrado que estas limitaciones tienen importantes efectos en el comportamiento de los sistemas cuánticos, entre los ejemplos que podemos mencionar relacionados con estos fenómenos se encuentran moléculas confinadas dentro de nanotubos, trampas tipo fullereno, nanocanales [1, 2] y el comportamiento de donadores de carga en pozos de potencial en estructuras semiconductoras [3, 4]. El modelo básico que se utiliza para describir el comportamiento de un sistema cuántico es un átomo de hidrógeno, ya que este es relativamente simple de trabajar, de modo que, se ha vuelto un sistema fundamental en el camino a entender sistemas más complicados o con más estructura. El estudio de este sistema bajo diferentes condiciones de confinamiento ha resultado de suma importancia en la física atómica y ha traído consigo una gran cantidad de estudios al respecto. Muchos de estos utilizan cavidades esféricas con un sistema hidrogenoide con potenciales penetrables [5–9] e impenetrables [2, 5, 10–15]; mientras que unos pocos han tratado el caso ligeramente más general con el sistema fuera del centro de la esfera [16]. Algunos otros trabajos han tratado con algunas geometrías no esféricas [2, 17–20], sin embargo, sistemas cuánticos en geometrías donde se encuentre presente algún tipo de asimetría han sido vagamente estudiados debido a la complejidad y a la anisotropía que estos presentan.

1.2. Modelos de sistemas asimétricos.

Por lo anterior, resulta interesante desarrollar herramientas que permitan modelar sistemas con asimetrías. Para ello es importante encontrar sus soluciones estacionarias para analizar el espectro de energías y el comportamiento de las funciones de onda. Este trabajo se enfoca

en obtener soluciones numéricas para sistemas con asimetrías a partir de las soluciones a la ecuación de Helmholtz. En primera instancia se aborda el tema en una dimensión como ejemplo representativo para mostrar su solución analítica dependiendo de las diferentes condiciones de frontera para posteriormente hacer lo mismo con un tratamiento numérico. Esto nos permitirá obtener confianza en los códigos de cómputo realizados para posteriormente estudiar un sistema con mayor complejidad.

Al estudiar sistemas más realistas se tienen asimetrías más complicadas así que se hará un desarrollo numérico que nos lleva a enfrentar un problema de eigenfunciones y eigenvalores. En este trabajo en particular se utilizará un esquema de diferencias finitas. Un sistema interesante es la ecuación de Helmholtz en dos dimensiones, en coordenadas polares, ya que esta geometría interpola entre modelos de nanotubos y planos infinitos dependiendo de los parámetros geométricos que se manejen. En este trabajo de tesis se considerarán las funciones de Bessel cuando se tiene simetría angular de tal manera que se compararán con los resultados numéricos utilizando diferencias finitas como ejemplo didáctico para mostrar la efectividad del método. Después se estudia la ecuación de Helmholtz en 2 dimensiones sin simetría angular, donde, conociendo previamente los resultados del caso con simetría angular tenemos un buen punto de partida para determinar los resultados que se obtendrán en este caso. Una vez se ha desarrollado suficiente confianza en los métodos numéricos aplicados mostraremos la utilidad de las herramientas desarrolladas en ejemplos relevantes en la física cuántica, en particular el oscilador armónico, el potencial escalón y diferentes formas del oscilador armónico truncado en una y dos dimensiones con y sin asimetrías. Esto busca determinar el comportamiento de los sistemas asimétricos a partir de entender el comportamiento de los sistemas simétricos. Finalmente mostraremos los resultados obtenidos, conclusiones y el trabajo a futuro.

Utilizaremos el lenguaje de programación Julia debido a que este posee una sintaxis similar a la de Python, con la ventaja de tener una velocidad de cálculo mayor. Esto hace que sea relativamente sencillo centrarnos en el problema físico sin distraernos demasiado en detalles computacionales. Además ofrece la posibilidad de hacer códigos computacionales en paralelo y posee una gran librería de funciones matemáticas. Estas razones hacen de Julia una excelente opción para trabajar.

1.3. Estructura del trabajo

Este texto consta de 7 capítulos en los que se desarrolla el trabajo mediante ejemplos que sirven para mostrar las ventajas de los métodos numéricos utilizados. Las soluciones numéricas se encuentran al resolver el problema de valores y vectores propios. Las comparaciones presentadas se hacen entre los valores propios analíticos y numéricos correspondientes cuando la simetría del sistema lo permite.

En el capítulo 2 se resuelve analíticamente la ecuación de Helmholtz en una dimensión, se obtiene su discretización y se muestra una comparación entre los resultados numéricos y analíticos

esperados. Se analizan principalmente los eigenvalores ya que es más sencillo hacer comparaciones con estos y con ello tener una idea de la convergencia de la solución en el mismo problema. Inicialmente se planeaba resolver el problema de eigenvalores mediante rotaciones de Householder de tal manera que después de un cierto número de pasos se obtuvieran los eigenvalores en la diagonal de la matriz, para esto se introdujo el programa *tqli* extraído de “Numerical Recipes” que hace uso de las características de este tipo de matrices. Sin embargo, la paquetería incluida en Julia cuenta con el programa *eigs* el cual realiza el mismo trabajo que *tqli* y además resuelve casos más generales que las matrices tridiagonales. La comparación de tiempo de cálculo y gasto de recursos muestra las ventajas de usar la paquetería incluida en Julia.

En el capítulo 3 se resuelve analíticamente la ecuación de Helmholtz en 2 dimensiones, de esta se deduce la ecuación de Bessel y se obtienen de esta última la solución analítica para posteriormente compararlas con las soluciones numéricas utilizando diferencias finitas.

En el capítulo 4 se presenta la solución numérica del problema de Helmholtz en 2 dimensiones, mostrando las complicaciones que presenta la discretización en las coordenadas angular y radial, entre ellas el número de elementos de nuestra matriz o la asignación de condiciones a la frontera. De esta manera se presenta la necesidad de encontrar los parámetros necesarios para obtener una precisión suficiente de la simulación. Posteriormente se muestra la comparación entre los valores encontrados numéricamente y los valores analíticos en ciertos casos.

En el capítulo 5 se modelan un conjunto de ejemplos de mecánica cuántica utilizando soluciones numéricas trabajando directamente con la ecuación de Schrödinger. Se desarrolla el problema del oscilador armónico infinito, oscilador armónico truncado y el potencial tipo escalón. En estos últimos dos se debió tener en cuenta la magnitud de la barrera de potencial bajo la que se puede encontrar la partícula, de otro modo, los resultados no serían comparables. También se presenta en este capítulo un par de modificaciones del oscilador armónico buscando poder describir el comportamiento de estos sistemas aprovechando la facilidad de la discretización en una dimensión y que no tienen solución analítica.

En el capítulo 6 se consideran sistemas cuánticos en dos dimensiones como el oscilador armónico infinito, oscilador armónico truncado, y osciladores armónicos truncados con asimetrías angulares. Nuevamente el oscilador armónico infinito sirve para verificar el comportamiento de las soluciones en dos dimensiones y como base comparativa del resto de los potenciales truncados y asimétricos, lo cual tiene la finalidad de mostrar el comportamiento del sistema a través del comportamiento de los valores propios cuando se pierde la simetría.

Finalmente en el capítulo 7 se muestran las conclusiones y el trabajo a futuro. Al final de este trabajo se incluyen tres apéndices. El primero muestra la velocidad de cálculo de valores propios del método utilizado respecto al de diferencias finitas centradas. El segundo explica la tridiagonalización y diagonalización de una matriz simétrica mediante matrices de Householder y el código *QR*. El último apéndice describe la estrategia general de programación para la solución del tipo de problemas abordados en esta tesis.

Ecuación de Helmholtz en una dimensión

La ecuación de Helmholtz

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = 0 \quad (2.1)$$

nombrada así por el médico y físico alemán Hermann von Helmholtz ha sido estudiada ampliamente debido a su surgimiento en problemas físicos que involucran la solución de ecuaciones diferenciales parciales, esta resulta un ejemplo útil y relativamente sencillo de como resolver este tipo de ecuaciones, lo que tiene una gran relevancia en matemáticas. Aparece naturalmente en física al estudiar fenómenos cuya naturaleza es ondulatoria. Aquellos problemas relacionados con la ecuación de onda o la ecuación de Schrödinger son algunos ejemplos en los que se vuelve necesario encontrar su solución [21, 22]. Por estas razones nos encontramos ante una importante herramienta matemática y educativa cuyo tratamiento resulta adecuado para los fines de este trabajo.

2.1. Soluciones analíticas

La ecuación de Helmholtz en una dimensión es un candidato sencillo para ilustrar el camino que tomará nuestro desarrollo

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

Si proponemos a $\psi(x) = e^{sx}$ como solución y la introducimos en (2.2) obtendremos [23, 24]

$$e^{sx}s^2 + e^{sx}k^2 = 0$$

entonces

$$s = \pm ik$$

de modo que la solución general a esta ecuación es

$$\psi(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx} \quad (2.3)$$

donde C_1 y C_2 son constantes que dependerán de las condiciones de frontera. A 2.3 aplicamos la fórmula de Euler

$$e^{ix} = \cos(x) + i \sin(x). \quad (2.4)$$

para obtener

$$\psi(x) = (C_1 + C_2) \cos(kx) + i(C_1 - C_2) \sin(kx). \quad (2.5)$$

Esta solución podría resultar satisfactoria, sin embargo, siempre que sea posible es preferible tener soluciones reales a nuestro problema. Entonces resultará conveniente notar que de la solución en (2.5) podemos construir una combinación lineal que nos proporciona una solución real dada por las funciones $u(x) = \cos(kx)$ y $v(x) = \sin(kx)$, por lo tanto, podemos considerar la solución general con valores reales

$$\psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx), \quad (2.6)$$

donde los coeficientes A , B y la solución específica a un problema particular dependerán del tipo de condiciones impuestas a nuestra ecuación.

2.2. Discretización de la función

La solución computacional de problemas sencillos con soluciones analíticas conocidas nos ayudará a generar confianza en nuestro método ya que al ofrecer resultados ampliamente conocidos es fácil comparar con trabajos previos y con base en estos resultados, establecer comparaciones con otro tipo de problemas donde el método sea aplicable. Si deseamos obtener una solución numérica, consideremos la ecuación (2.2) y multipliquemos ψ^* por la izquierda e integremos en x de 0 a L [17]

$$\int_0^L \left\{ \psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2 \psi^* \psi \right\} dx = 0. \quad (2.7)$$

Integrando por partes, tomando $u = \psi^*$ y $dv = \frac{d^2\psi}{dx^2} dx$, entonces $du = \frac{d\psi^*}{dx} dx$ y $v = \frac{d\psi}{dx}$, para de esta manera obtener:

$$\left\{ \psi^* \frac{d\psi}{dx} \right\}_0^L - \int_0^L \left\{ \frac{d\psi^*}{dx} \frac{d\psi}{dx} - k^2 \psi^* \psi \right\} dx = 0. \quad (2.8)$$

Las condiciones en los extremos pueden aplicarse de diferentes maneras dependiendo de nuestro problema. Para nuestros propósitos es conveniente considerar una de las condiciones siguientes que podemos asociar físicamente a un problema de una cuerda oscilante en distintas configuraciones:

Las condiciones tipo Dirichlet [23] se presentan si $\psi(0) = \psi(L) = 0$ y describen una cuerda que se encuentra fija en ambos extremos.

Las condiciones tipo Neumann-Dirichlet [23] se presentan cuando $\frac{d\psi}{dx} \Big|_0 = 0$, $\psi(L) = 0$ ó $\frac{d\psi}{dx} \Big|_L = 0$,

$\psi(0) = 0$ de modo que la cuerda se encuentra fija en uno de sus extremos y el otro extremo puede moverse libremente.

Una última condición a tener en cuenta es donde $\psi(0) = \psi(L)$ y $\frac{d\psi}{dx}\Big|_0 = \frac{d\psi}{dx}\Big|_L$ este tipo de condiciones son llamadas cíclicas [23] y representa una cuerda circular vibrando y sujeta a un punto fijo. De manera que con cualquiera de estas condiciones obtenemos

$$\int_0^L \frac{d\psi^*}{dx} \frac{d\psi}{dx} dx = \int_0^L k^2 \psi^* \psi dx. \quad (2.9)$$

Usaremos la siguiente discretización para el funcional en la integral [17]

$$x \rightarrow x_i, \quad dx \rightarrow x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}, \quad \frac{d\psi}{dx} \rightarrow \frac{\psi_{i+\frac{1}{2}} - \psi_{i-\frac{1}{2}}}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} \text{ donde } x_{i\pm\frac{1}{2}} = \frac{x_i + x_{i\pm 1}}{2}. \quad (2.10)$$

Esto es, representamos nuestra discretización como los promedios de los valores más cercanos en la malla. Esta discretización es conveniente debido a que, de ser necesario, nos permite centrar los cálculos en alguna región del espacio asignando un mayor número de puntos a regiones específicas de la malla que sean de mayor interés. Esto, a pesar de no ser muy útil en este problema, sí puede aplicarse a sistemas donde eventos importantes sucedan en regiones específicas en donde resulta importante centrar nuestro interés. Si reescribimos el funcional discretizado obtenemos

$$\sum_{i=1}^N \frac{(\psi_{i+\frac{1}{2}}^* - \psi_{i-\frac{1}{2}}^*)(\psi_{i+\frac{1}{2}} - \psi_{i-\frac{1}{2}})}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} = k^2 \sum_{i=1}^N (x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}) \psi_i^* \psi_i \quad (2.11)$$

o bien

$$\sum_{i=1}^N \frac{\psi_{i+\frac{1}{2}}^* \psi_{i+\frac{1}{2}}}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} - \frac{\psi_{i+\frac{1}{2}}^* \psi_{i-\frac{1}{2}}}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} - \frac{\psi_{i-\frac{1}{2}}^* \psi_{i+\frac{1}{2}}}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} + \frac{\psi_{i-\frac{1}{2}}^* \psi_{i-\frac{1}{2}}}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} = k^2 \sum_{i=1}^N (x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}) \psi_i^* \psi_i.$$

Entonces tenemos la suma del producto de i elementos. Buscamos optimizar el funcional, de manera que, buscaremos la función que optimiza este integrando, para esto utilizamos la definición de $\psi_{i\pm\frac{1}{2}}$ y derivamos respecto a $\frac{d}{d\psi_i^*}$ ya que buscamos la solución de ψ_i y obtenemos la siguiente expresión

$$\sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \right) 2\psi_i - \frac{2\psi_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} - \frac{2\psi_{i+1}}{x_{i+1} - x_i} = k^2 \sum_{i=1}^N (x_{i+1} - x_{i-1}) \psi_i \quad (2.12)$$

con $i = 1, \dots, N$.

Ahora podemos reescribir esto último mediante un sistema de ecuaciones que puede ser representado mediante una ecuación matricial definiendo

$$H_{i,i} = 2 \left(\frac{1}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \right), \quad H_{i,i+1} = -\frac{2}{x_{i+1} - x_i}$$

$$H_{i,i-1} = -\frac{2}{x_i - x_{i-1}} \quad (2.13)$$

de modo que

$$\begin{aligned}
 & \begin{bmatrix} H_{1,1} & H_{1,2} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ H_{2,1} & H_{2,2} & H_{2,3} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & H_{N-1,N-1} & H_{N-1,N} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & H_{N,N-1} & H_{N,N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{bmatrix} \\
 & = k^2 \begin{bmatrix} D_{1,1} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & D_{2,2} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & D_{N-1,N-1} & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & D_{N,N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{bmatrix} \tag{2.14}
 \end{aligned}$$

la matriz tridiagonal y simétrica en el lado izquierdo de la ecuación la llamaremos \mathbb{H} , por otro lado, la matriz diagonal en el lado derecho de la ecuación la llamaremos \mathbb{D} . La ventaja de tener una matriz simétrica es que los eigenvalores son reales y sólo se tienen que programar explícitamente los elementos de matriz en la diagonal principal y los de una de las diagonales reduciendo de esta manera el tiempo de cálculo. Deseamos dejar libre a $\vec{\psi}$ en el lado derecho de la ecuación de manera simétrica y así tener un sistema de ecuaciones para $\vec{\psi}_s$ que dependa de los valores en la malla. Este procedimiento es necesario debido a que el operador de la ecuación es hermitiano y por lo tanto es deseable que su contraparte numérica posea las mismas propiedades, de otro modo estaríamos trabajando con operadores cuyas propiedades no corresponden con los de nuestro problema. Así que para simplificar la expresión anterior consideremos la siguiente transformación $\vec{\psi} = \mathbb{L}\vec{\phi}$ [17], entonces:

$$\mathbb{H}\mathbb{L}\vec{\phi} = k^2\mathbb{D}\mathbb{L}\vec{\phi} \tag{2.15}$$

ahora multiplicaremos por el lado izquierdo por \mathbb{L}^\dagger y pidamos que

$$\mathbb{L}^\dagger = \mathbb{L}$$

y que

$$\mathbb{L}^\dagger\mathbb{D}\mathbb{L} = \mathbb{I}. \tag{2.16}$$

De (2.16) notemos que si multiplicamos por el lado derecho por \mathbb{L}^{-1} obtendremos

$$\mathbb{L}\mathbb{D} = \mathbb{L}^{-1}$$

luego, al multiplicar por el lado izquierdo por \mathbb{L} obtendremos que

$$\mathbb{L}^2\mathbb{D} = \mathbb{I}.$$

De esta manera si multiplicamos por la derecha por \mathbb{D}^{-1} encontramos que

$$\mathbb{L}^2 = \mathbb{D}^{-1}.$$

Debido a que \mathbb{D} es una matriz diagonal, su inversa y \mathbb{L}^2 también lo son, ya que ambos son diagonales. Entonces los elementos de \mathbb{L} son $\mathbb{L}_{i,j} = \frac{\delta_{i,j}}{(x_{i+1}-x_{i-1})^{\frac{1}{2}}}$ y por lo tanto la ecuación matricial se modifica de la siguiente manera

$$\mathbb{L}\mathbb{H}\mathbb{L}\phi = k^2\phi. \quad (2.17)$$

Sí desarrollamos el producto de matrices obtenemos la matriz de coeficientes siguiente:

$$\begin{bmatrix} H_{1,1}L_{1,1}^2 & H_{1,2}L_{1,1}L_{2,2} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ H_{2,1}L_{1,1}L_{2,2} & H_{2,2}L_{2,2}^2 & H_{2,3}L_{2,2}L_{3,3} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & H_{N-1,N-1}L_{N-1,N-1}^2 & H_{N-1,N}L_{N-1,N-1}L_{N,N} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & H_{N,N-1}L_{N,N}L_{N-1,N-1} & H_{N,N}L_{1,1}^2 \end{bmatrix}.$$

Gracias a este resultado podemos escribir la siguiente relación de recurrencia que se obtiene solamente de desarrollar los productos de los elementos de (2.17)

$$\left(\frac{1}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \right) \frac{2\phi_i}{x_{i+1} - x_{i-1}} - \frac{2\phi_{i-1}}{(x_i - x_{i-1})\sqrt{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_i - x_{i-2})}} - \frac{2\phi_{i+1}}{(x_{i+1} - x_i)\sqrt{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+2} - x_i)}} = k^2\phi_i \quad (2.18)$$

que escribiremos de la siguiente manera

$$H_{i,i}\phi_i + H_{i,i-1}\phi_{i-1} + H_{i,i+1}\phi_{i+1} = k^2\phi_i \quad (2.19)$$

donde

$$\begin{aligned} H_{i,i} &= \left(\frac{1}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \right) \frac{2}{x_{i+1} - x_{i-1}} \\ H_{i,i-1} &= -\frac{2}{(x_i - x_{i-1})\sqrt{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_i - x_{i-2})}} \\ H_{i,i+1} &= -\frac{2}{(x_{i+1} - x_i)\sqrt{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+2} - x_i)}}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

con esto ya es posible expresar el problema en términos matriciales y podemos resolver el problema de valores propios. La enorme cantidad de elementos en nuestra matriz hace difícil el cálculo de modo que aprovechar la tridiagonalidad mediante transformaciones de Householder , el algoritmo QR y matrices dispersas [25, 26] reduce el trabajo enormemente y de esta manera se reduce también el tiempo de cálculo. Se realizó un programa que resuelve el problema de eigenvalores surgido al discretizar la ecuación original, considerando las condiciones de frontera correspondientes en cada caso. Se consideran condiciones tipo Dirichlet, Neumann-Dirichlet y cíclicas a nuestra ecuación diferencial de manera que se pueda apreciar como es modificada la matriz en cada caso, considerando que $H_{i,j} = H_{i,j}L_{i,i}L_{j,j}$.

2.3. Comparación de resultados de las condiciones a la frontera

Como es de esperarse los valores k de (2.18) coinciden con los eigenvalores al imponer cada una de las condiciones de frontera, de manera que los eigenvalores obtenidos de nuestro cálculo numérico deben diferenciarse muy poco de estos que se pueden obtener analíticamente. De este modo, necesitamos aprender cómo modifican las condiciones a la frontera al cálculo numérico.

2.3.1. Condiciones tipo Dirichlet

Este tipo de condiciones especifican que valores en la frontera sobre la función sean nulos. En este caso lo haremos de la siguiente manera

$$\psi(0) = 0 \text{ y } \psi(L) = 0, \quad (2.21)$$

de este modo estaremos resolviendo el problema de una cuerda unidimensional fija en los extremos [23] . Al introducir estas condiciones en (2.6) obtenemos

$$\begin{aligned} \psi(0) &= A \cos(0) + B \sin(0) = A = 0, \\ \psi(L) &= B \sin(kL) = 0 \end{aligned}$$

si buscamos una solución diferente a la trivial entonces $\sin(kL) = 0$ y

$$k = \frac{n\pi}{L} \text{ con } n \in \mathbb{N}, \quad (2.22)$$

así, se tiene como solución

$$\psi(x) = B \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \text{ con } n \in \mathbb{N}. \quad (2.23)$$

Debemos considerar una malla de $N + 2$ elementos, ya que el primero y último elementos representan los extremos de nuestro sistema, de manera que las condiciones de frontera se presenten en nuestra malla como $\phi_0 = \phi_{N+1} = 0$. Debido a esta condición no es necesario incluir estos elementos en nuestro cálculo numérico y la matriz modificada por las condiciones de frontera \mathbb{H}' tiene la misma forma que la matriz original

$$\begin{bmatrix} H'_{1,1} & H'_{1,2} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ H'_{2,1} & H'_{2,2} & H'_{2,3} & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & H'_{N-1,N-2} & H'_{N-1,N-1} & H'_{N-1,N} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & H'_{N,N-1} & H'_{N,N} \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

Los programas utilizados para el calculo de valores propios son *tqli* y *eigs*. El programa *tqli*, extraído de [25] aprovecha la estructura de la matriz tridiagonal, ya que en dos de los tres casos

correspondientes a esta sección la matriz es tridiagonal y este programa toma ventaja de este hecho para realizar una serie de transformaciones de Householder en la matriz de modo que al final se obtendrán los valores propios en la diagonal principal de la matriz en orden creciente. El programa *eigs* es un método de la librería *LAPACK* incluida en *Julia* para el cálculo de valores y vectores propios los cuales se realizarón en precisión doble.

Mostramos primero la gráfica de la evolución de las diferencias entre los eigenvalores obtenidos con el programa *tqli* y con el programa *eigs* y los valores esperados, la diferencia se gráfica contra el tiempo que tardo cada programa en finalizar el cálculo de eigenvalores.

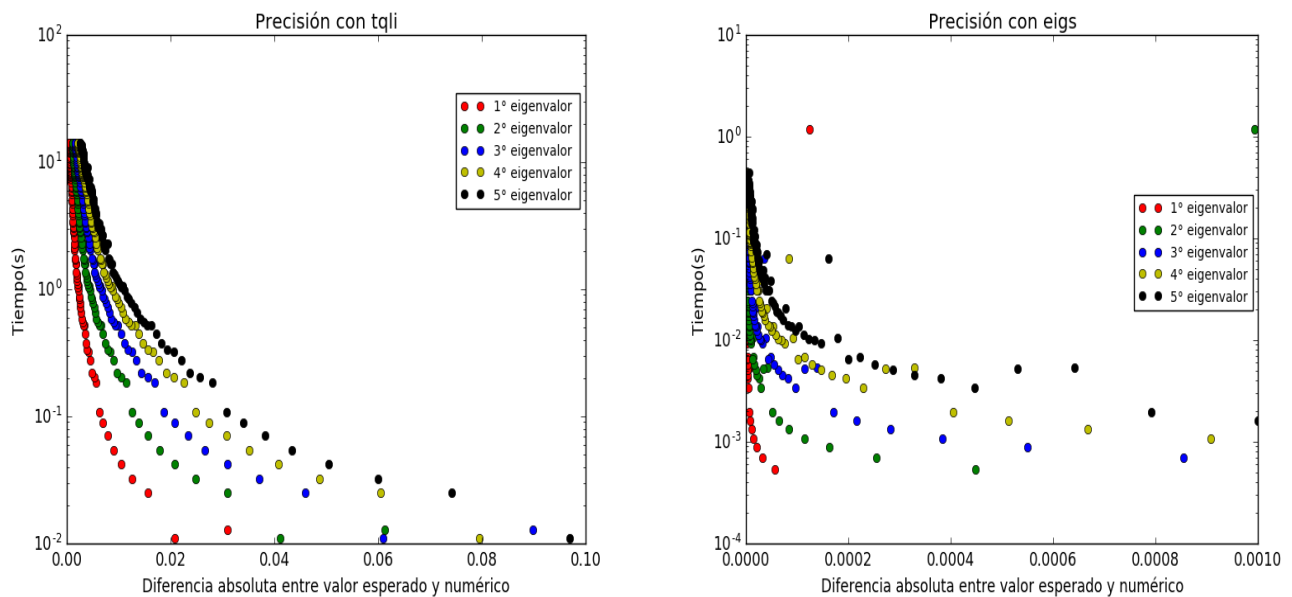


Figura 2.1: Evolución de la precisión contra el tiempo de ejecución de los eigenvalores calculados con *tqli* (izquierda) y con *eigs* (derecha). Se puede observar en la escala que *eigs* alcanza una precisión mayor que *tqli*.

Notamos primeramente en la Figura 2.1 que la escala en *eigs* es la menor de ambos gráficos. El programa *tqli* alcanza tiempos mínimos y máximos mayores a los obtenidos con *eigs*. La diferencia mínima y máxima es mayor con *tqli* que con *eigs* y no sólo eso, vemos que las diferencias entre valores numéricos y esperados crece mientras el tiempo de cálculo disminuye debido al aumento de divisiones en la malla ya que esto aumenta el número de puntos utilizados para aproximar cada eigenfunción y con ello los cálculos necesarios para obtener cada eigenvalor. La consecuencia de esto también puede notarse en la Figura 2.2 donde hay un aumento en la cantidad de puntos utilizados para el cálculo del eigenvalor pero esto conlleva a una mejora en la aproximación del valor esperado. Otro efecto relevante que notamos es que, en general los eigenvalores de menor orden alcanzan menores diferencias a mayores tiempos ya que los eigenvalores de orden mayor están asociados a eigenfunciones de orden mayor los cuales presentan mayor oscilación, lo cual, complica el cálculo de las eigenfunciones y como consecuencia

resta precisión al eigenvalor asociado. Un ejemplo claro de este tipo de comportamiento puede apreciarse en la figura 2.3 donde se intenta aproximar la función seno y podemos apreciar que un aumento en la cantidad de puntos utilizados tiene como consecuencia una mejora en la aproximación de la función. Debido a estos resultados podemos decir, que en este caso, es más conveniente trabajar con *eigs* ya que ofrece resultados mas precisos en un menor tiempo utilizando los mismos recursos.

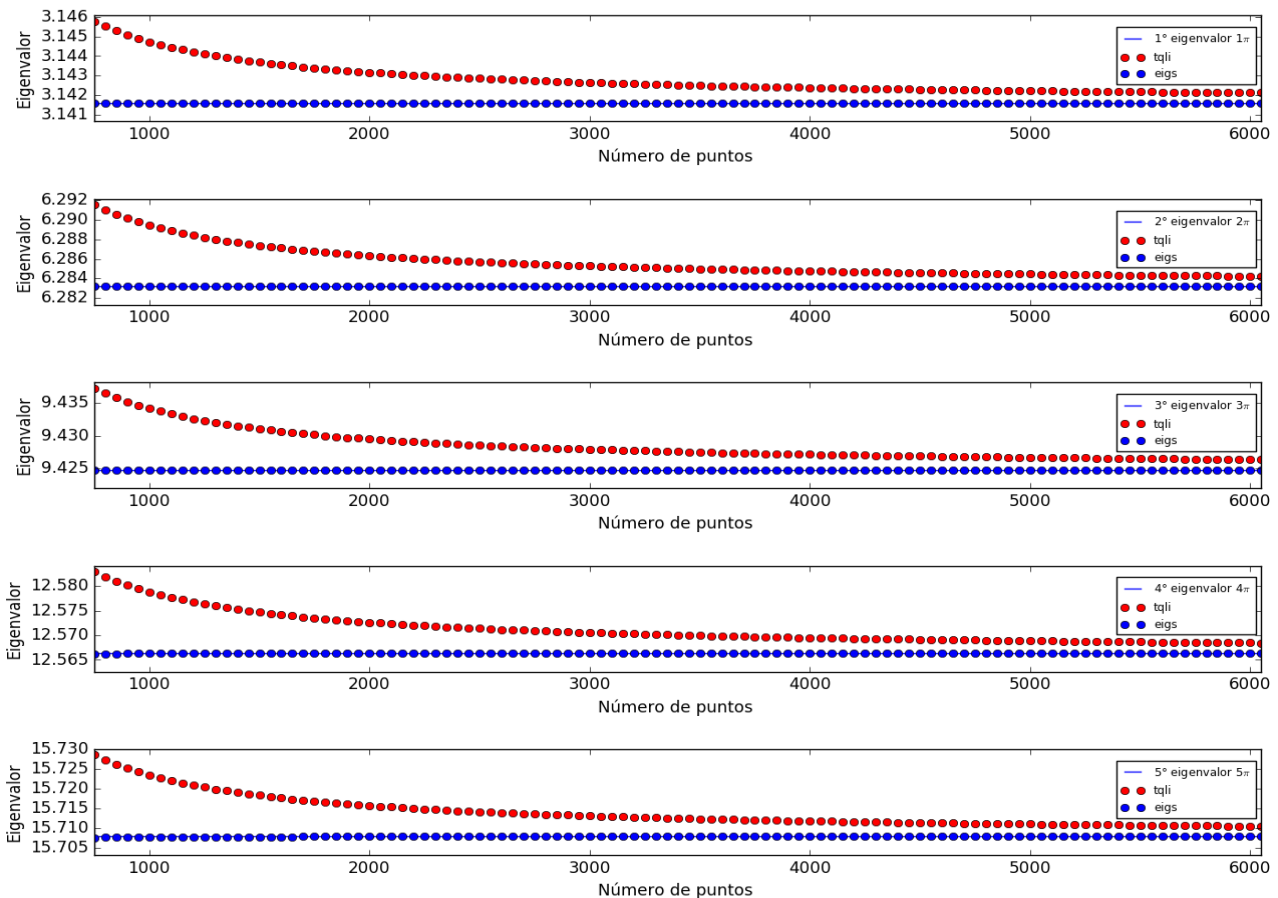


Figura 2.2: Evolución numérica del eigenvalor calculado con *eigs* y *tqli*. Se puede apreciar como *eigs* alcanza valores más cercanos al valor esperado representado por una línea azul.

En la Figura 2.2 hemos graficado la evolución del valor numérico obtenido de acuerdo al número de puntos usados en cada caso y podemos resaltar que menos de 1000 puntos son suficientes para que la función converja a tres cifras después del punto. Por otro lado observamos que, para la misma cantidad de puntos en la malla, el valor numérico se encuentra más cerca del valor teórico para los eigenvalores de orden superior, de modo que, esto muestra que trabajar con los eigenvalores de orden menor siempre que sea posible resulta más conveniente ya que requerimos

una menor cantidad de puntos, menor gasto de recursos, menor número de cálculos y por lo tanto un menor tiempo de cálculo, lo que resulta idóneo cuando se desea agilizar el trabajo. Las eigenfunciones para los primeros tres eigenvalores se muestran en la Figura 2.4 y tienen una forma senoidal que depende del grado de excitación de la función. Por último señalamos que los valores obtenidos con *tqli* siempre se encuentran más lejanos al valor esperado que los obtenidos con *eigs*, de modo que en este caso podemos concluir que *eigs* es más preciso, rápido y requiere una menor cantidad de recursos para entregar mejores resultados que *tqli*.

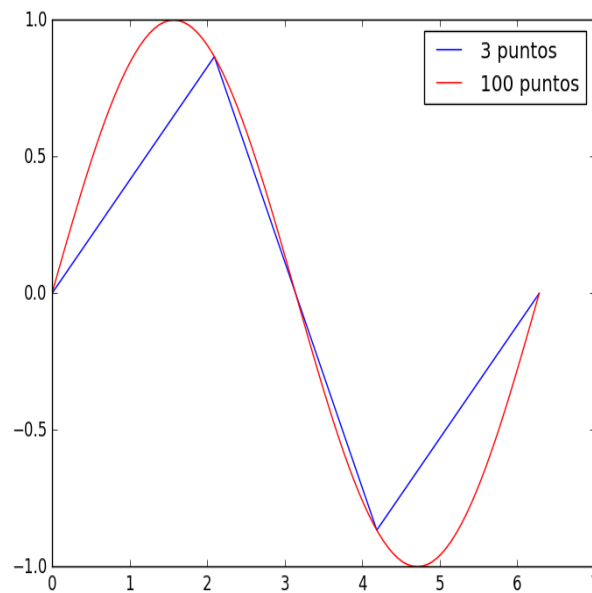


Figura 2.3: Aproximación numérica de la función seno en el intervalo 0 a 2π . Es evidente como el aumento en la cantidad de puntos implica una mejor aproximación de la función.

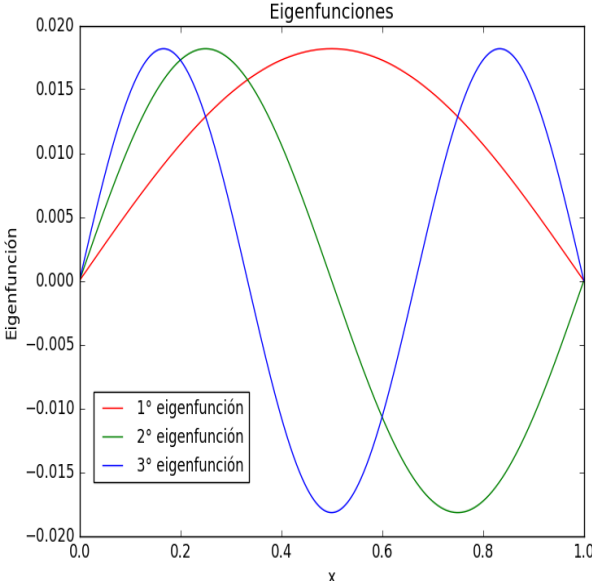


Figura 2.4: Eigenfunciones correspondientes a los primeros tres eigenvalores calculados con N puntos. Estas eigenfunciones se presentan normalizadas.

2.3.2. Condiciones tipo Neumann-Dirichlet

En este tipo de condiciones se especifican valores sobre la derivada de la función y sobre la función misma. Estas se representan como

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad \psi(L) = 0 \quad (2.25)$$

de modo que representemos una cuerda unidimensional en la que un extremo es fijo y el otro se mueve libremente [23], entonces la componente vertical de la tensión en la cuerda en este extremo es cero ya que es proporcional a la derivada. Para imponer las condiciones es necesario calcular la derivada de (2.6)

$$\psi'(x) = k(-A \sin(kx) + B \cos(kx)) \quad (2.26)$$

al imponer las condiciones sobre la solución y su derivada encontramos

$$\begin{aligned} \psi(L) &= A \cos(kL) + B \sin(kL) = 0 \\ &\text{y} \\ \psi'(0) &= k(-A \sin(0) + B \cos(0)) = kB = 0 \\ &\text{entonces} \\ B &= 0 \text{ y } A \cos(kL) = 0 \end{aligned}$$

si estamos interesados en una solución diferente a la trivial entonces $\cos(kL) = 0$ y por lo tanto

$$k = \frac{(2n+1)\pi}{2L} \text{ con } n \in \mathbb{N} \quad (2.27)$$

entonces, la solución es

$$\psi(x) = A \cos\left(\frac{(2n+1)\pi x}{2L}\right) \text{ con } n \in \mathbb{N}. \quad (2.28)$$

En los valores numéricos de la malla estas condiciones se traducen en las expresiones $\phi_0 = \phi_1$ como una primera aproximación a los elementos de la derivada en el origen y $\phi_{N+1} = 0$ de modo que tendremos $N + 1$ elementos, pero el último de ellos es cero dejándonos con una matriz de $N \times N$ como la siguiente

$$\begin{bmatrix} H'_{1,1} + H'_{1,0} & H'_{1,2} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ H'_{2,1} & H'_{2,2} & H'_{2,3} & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & H'_{N-1,N-2} & H'_{N-1,N-1} & H'_{N-1,N} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & H'_{N,N-1} & H'_{N,N} \end{bmatrix} \quad (2.29)$$

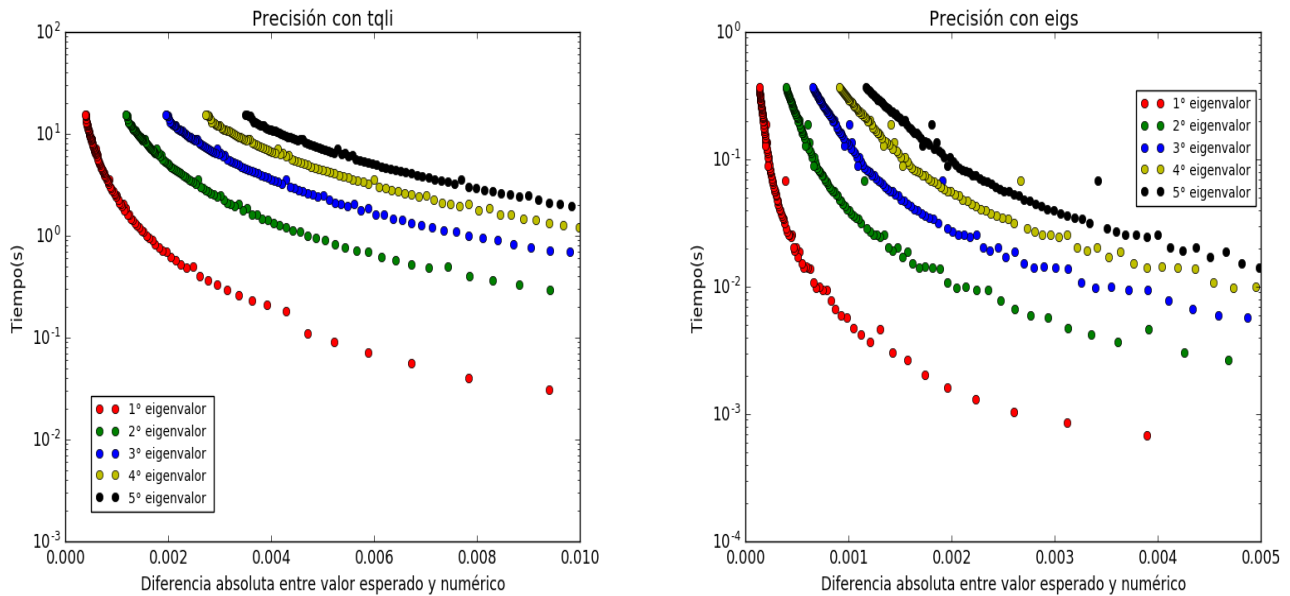


Figura 2.5: Evolución de la precisión contra el tiempo de ejecución de los eigenvalores calculados con *tqli* (izquierda) y con *eigs* (derecha). Nuevamente la escala en *tqli* es mayor que la correspondiente a *eigs*.

En la Figura 2.5 encontramos resultados similares a los del caso anterior, menores tiempos y mayor precisión para *eigs*. También menores tiempos y mayor precisión para los eigenvalores de orden menor. En la Figura 2.6 observamos que nuevamente *eigs* genera resultados más cercanos al valor esperado que *tqli* para la misma cantidad de puntos y que los eigenvalores de orden menor siempre se acercan más al valor teórico. Las eigenfunciones para los primeros tres eigenvalores se muestran en la Figura 2.7 y estos tienen una forma tipo coseno del lado izquierdo y tipo seno del lado derecho.

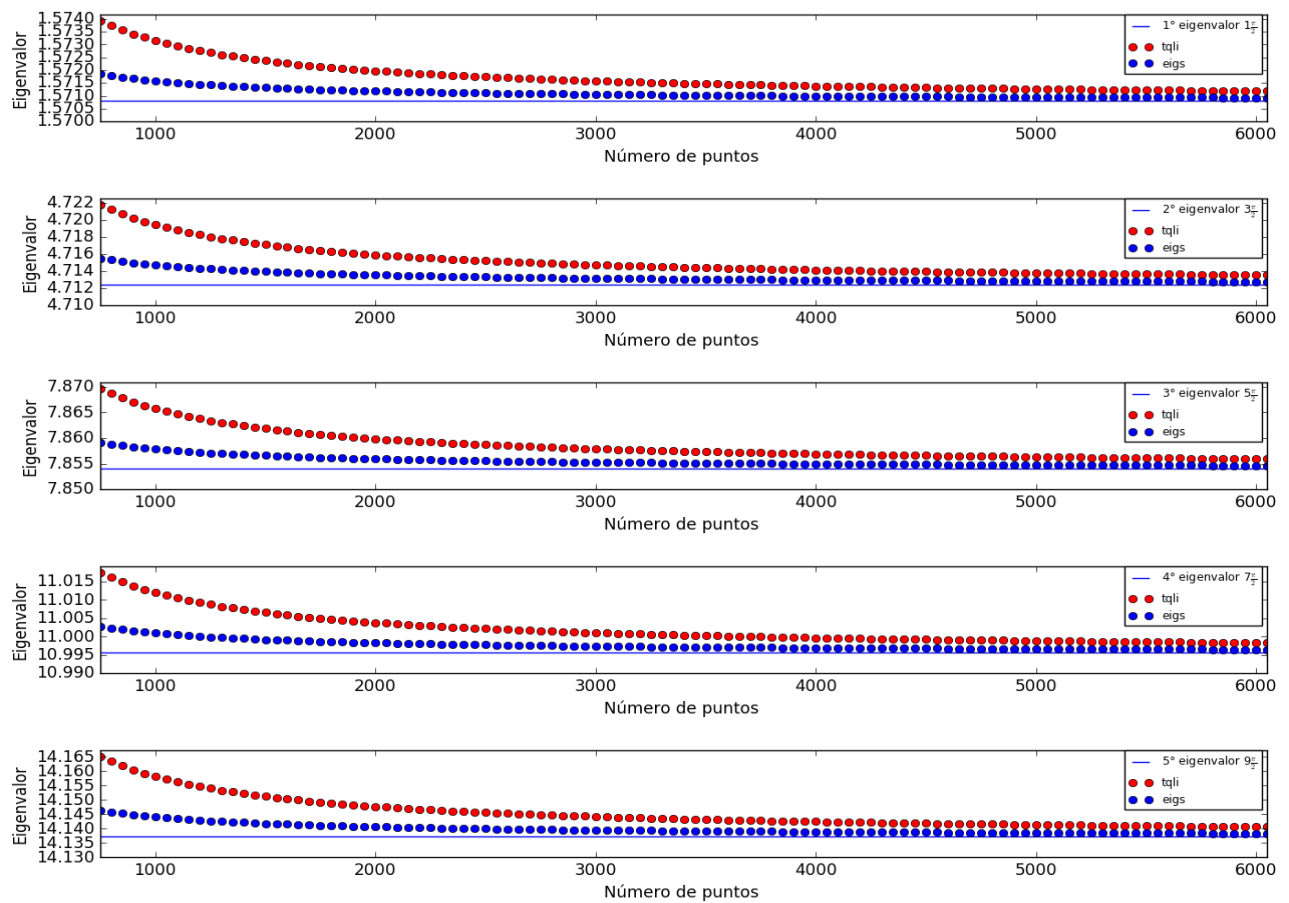


Figura 2.6: Evolución numérica del eigenvalor calculado con *eigs* y *tqli*. Nuevamente *eigs* alcanza valores más cercanos al valor esperado representado por una línea azul.

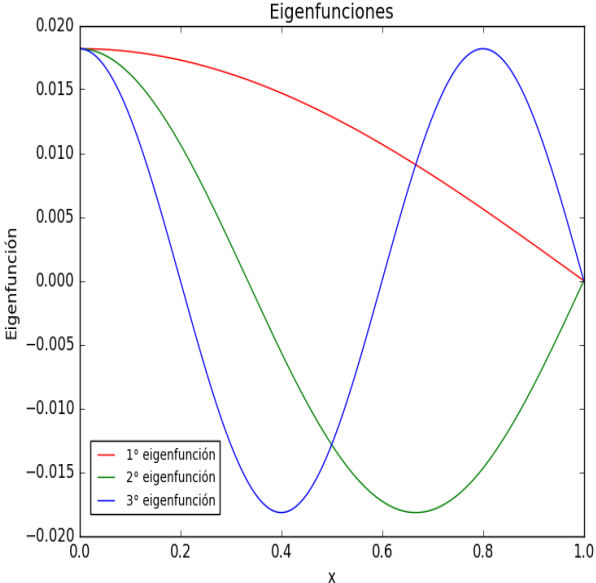


Figura 2.7: Eigenfunciones para los primeros tres eigenvalores calculados con N puntos. Estas eigenfunciones se presentan normalizadas.

2.3.3. Condiciones cíclicas

Este tipo de condiciones se suelen usar en funciones que dependen de alguna manera de la variable angular o donde los valores de la función se espera se repitan de forma cíclica. Podemos modelar con este tipo de condiciones una cuerda circular vibrando [23]. Entonces en los extremos los valores de la función y su derivada cumplen que $\psi(0) = \psi(L)$ y $\left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=L}$. La solución se encontrara al resolver el sistema resultante de aplicar las condiciones de frontera

$$\begin{aligned}\psi(0) &= A = A \cos(kL) + B \sin(kL) = \psi(L) \\ \psi'(0) &= kB = k(-A \sin(kL) + B \cos(kL)) = \psi'(L)\end{aligned}\tag{2.30}$$

entonces

$$\begin{aligned}A(1 - \cos(kL)) - B \sin(kL) &= 0 \\ -A \sin(kL) - B(1 - \cos(kL)) &= 0\end{aligned}\tag{2.31}$$

ya que el sistema es homogéneo y para que exista una solución no trivial debe cumplirse

$$\begin{vmatrix} 1 - \cos(kL) & -\sin(kL) \\ -\sin(kL) & -(1 - \cos(kL)) \end{vmatrix} = 0\tag{2.32}$$

entonces

$$\begin{aligned}(1 - \cos(kL))^2 + \sin^2(kL) &= 0 \\ \text{así} \\ \cos(kL) &= 1\end{aligned}$$

de modo que

$$k = \frac{2n\pi}{L} \text{ con } n = 0, 1, 2, 3, \dots\tag{2.33}$$

y finalmente la solución es

$$\psi(x) = A \cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) + B \sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right).\tag{2.34}$$

La condición en nuestra malla se muestra como $\phi_0 = \phi_N$ y la matriz \mathbb{H} cambia de la siguiente manera

$$\begin{bmatrix} H'_{1,1} & H'_{1,2} & 0 & \cdots & 0 & 0 & H'_{1,N} \\ H'_{2,1} & H'_{2,2} & H'_{2,3} & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & H'_{N-1,N-2} & H'_{N-1,N-1} & H'_{N-1,N} \\ H'_{N,1} & 0 & 0 & \cdots & 0 & H'_{N,N-1} & H'_{N,N} \end{bmatrix}\tag{2.35}$$

debido a la relación de recurrencia y a la condición de frontera es importante notar que para $i = 1$

$$\left(\frac{1}{x_1 - x_0} + \frac{1}{x_2 - x_1}\right) \frac{2\phi_1}{x_2 - x_0} - \frac{2\phi_N}{(x_1 - x_0)\sqrt{(x_2 - x_0)(x_1 - x_{-1})}} - \frac{2\phi_2}{(x_2 - x_1)\sqrt{(x_2 - x_0)(x_3 - x_1)}} = k^2\phi_1 \quad (2.36)$$

y para $i = N$

$$\left(\frac{1}{x_N - x_{N-1}} + \frac{1}{x_{N+1} - x_N}\right) \frac{2\phi_N}{x_{N+1} - x_{N-1}} - \frac{2\phi_{N-1}}{(x_N - x_{N-1})\sqrt{(x_{N+1} - x_{N-1})(x_N - x_{N-2})}} - \frac{2\phi_1}{(x_{N+1} - x_N)\sqrt{(x_{N+1} - x_{N-1})(x_{N+2} - x_N)}} = k^2\phi_N. \quad (2.37)$$

Como podemos ver la condición de frontera genera problemas ya que los elementos x_{-1} y x_{N+2} no parecen estar en nuestra malla; sin embargo, esto ha de interpretarse de acuerdo al problema con el que estamos trabajando ya que en principio nuestra malla es cerrada de manera que habría de repetirse periódicamente cada ciertos valores, en este caso 2π radianes.

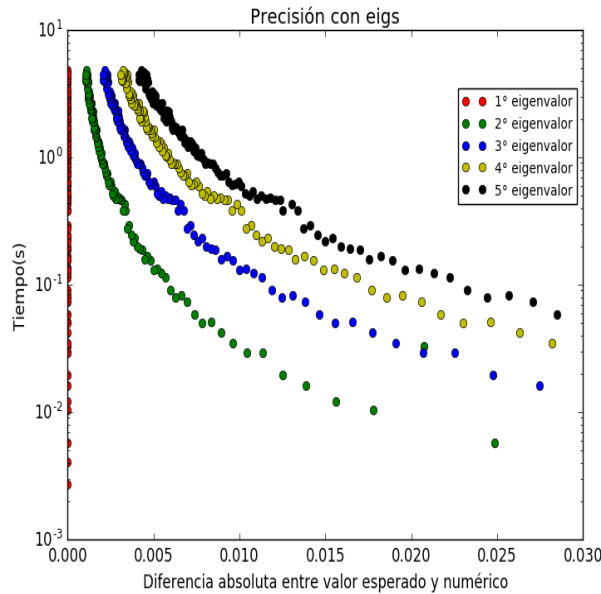


Figura 2.8: Evolución de la precisión contra el tiempo de ejecución de los eigenvalores calculados con *eigs*. La escala es mayor que en ejemplos anteriores indicando que el valor numérico tarda más tiempo en acercarse al valor esperado que en casos anteriores y por lo tanto requiere un mayor gasto de recursos.

Por otro lado las diferencias que aparecen en nuestra relación de recurrencia expresan la distancia entre 2 puntos próximos, de manera que, al aparecer en la expresión la diferencia $x_1 - x_{-1}$ esto se ha de interpretar como la distancia entre el punto x_1 y el punto $x_{-1} = x_N$ o sea $2\pi + x_1 - x_N$, ya que, el último elemento de nuestra malla es $x_{N+1} = 2\pi$, entonces debemos calcular $x_{N+1} + x_1 - x_N$; lo mismo sucede para la interpretación de $x_{N+2} - x_N$ debemos interpretar la expresión como la diferencia de $x_{N+2} = x_1$ y x_N .

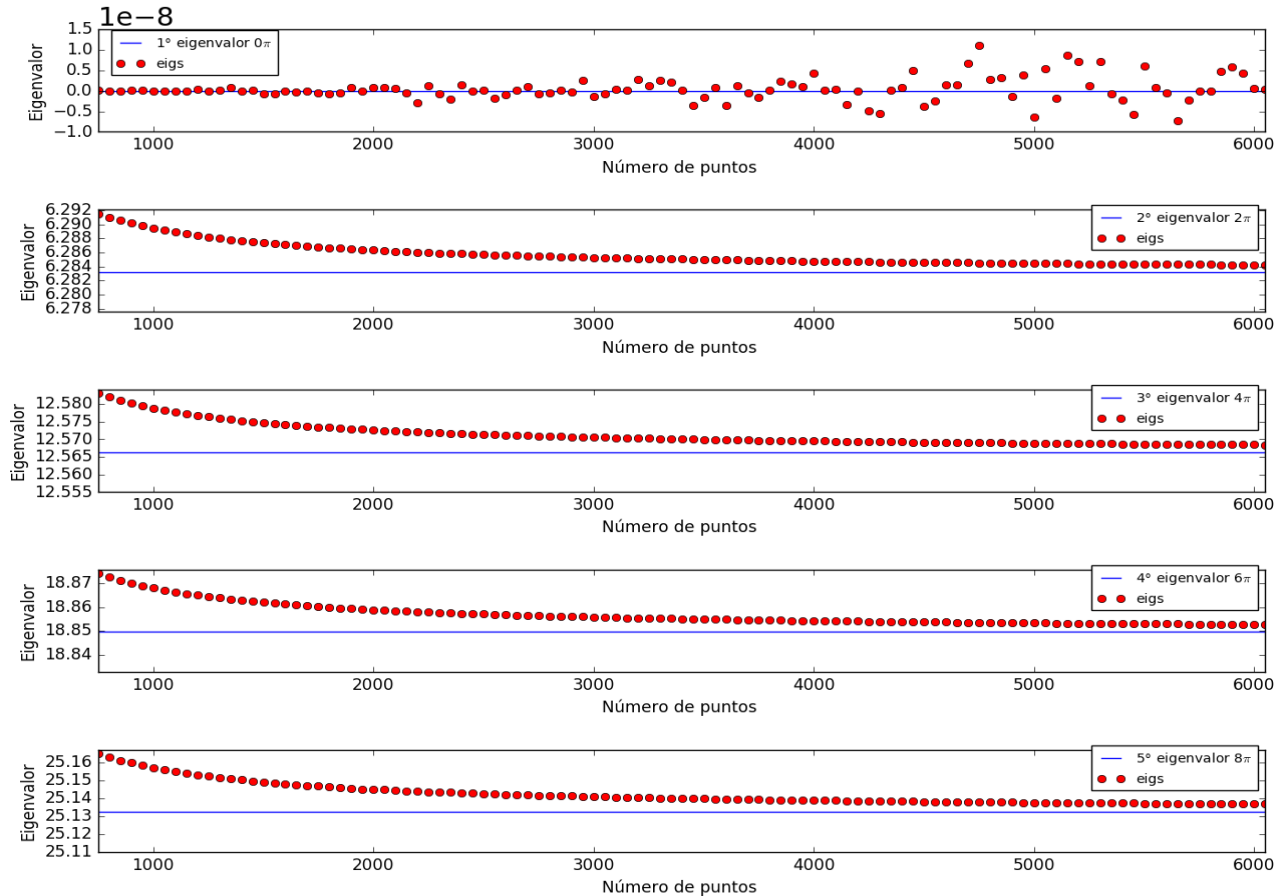


Figura 2.9: Evolución numérica del eigenvalor contra el número de puntos. De las condiciones anteriores podemos mencionar que este tipo de condición a la frontera requiere más puntos en la malla para poder obtener una buena precisión de cálculo de modo que es más complicado obtener resultados adecuados. Las líneas azules representan el valor esperado.

Es de resaltar que en este caso no se ha utilizado el programa *tqli* ya que trabaja exclusivamente con matrices tridiagonales lo cual no se cumple en este problema. Los resultados mostrados en la Figura 2.8 muestran la evolución de las diferencias entre los valores teóricos y numéricos contra el tiempo de obtención de resultados. Como podemos observar el primer resultado numérico obtenido es prácticamente cero. El eigenvalor cero corresponde a una eigenfunción asociada que permanece constante, lo que puede apreciarse en la Figura 2.10, esto se presenta ya que 2.33 no impone ninguna restricción a que n sea cero, por lo tanto k puede ser cero

y entonces 2.34 permite una eigenfunción constante. Geométricamente este valor se presenta debido a una constante de rotación presente en la geometría circular. En la Figura 2.9 vemos que cerca de cero el método no parece el adecuado, ya que, al aumentar las divisiones de la malla el resultado se aleja del valor teórico, esto puede deberse a que el error numérico crece al aumentar las divisiones de la malla y con esto disminuir la distancia entre un punto y otro, sin embargo, por la escala del valor para cero y dadas nuestras exigencias de precisión podemos decir que en realidad el valor numérico siempre se encuentra lo suficiente cercano de cero. El resto de los valores obtenidos presenta un comportamiento similar a los casos anteriores, el primero diferente de cero es el que más cerca se encuentra del valor teórico y el resto se acercan cada vez menos debido a la oscilación de las eigenfunciones de ordenes superiores requiriendo una mayor cantidad de puntos para poder aproximarlas adecuadamente y causando esto un aumento en el tiempo de cálculo. Las eigenfunciones para los primeros tres eigenvalores se muestran en la Figura 2.10 el primero de estos corresponde a una constante como se explico previamente, los 2 restantes tienen forma de senos y cosenos.

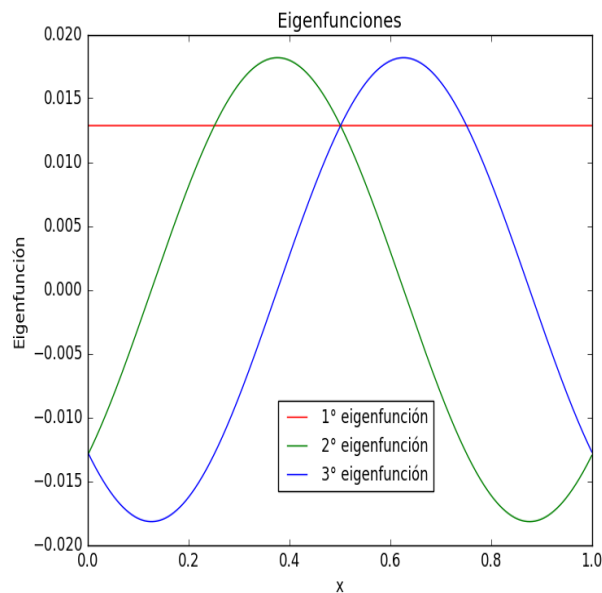


Figura 2.10: Eigenfunciones para los primeros tres eigenvalores. La primera de ellas corresponde a una constante lo que corresponde al eigenvalor 0 de k que puede obtenerse numérica y analíticamente. Estas eigenfunciones se presentan normalizadas.

Hemos mostrado pues el método numérico que utilizaremos el resto del trabajo además del proceso mediante el cual transformamos nuestro problema de resolver una ecuación diferencial en uno que consiste en hallar eigenvalores y eigenfunciones que obtengan una aproximación numérica de la solución analítica esperada y eso no es todo sino que el método utilizado nos permite usar matrices tridiagonales, simétricas y lo mas importante hermitianas así nuestro método numérico no sólo se enfoca en encontrar las aproximaciones numéricas esperadas sino de que el método sea lo más consistente posible con el marco teórico. Los resultados muestran que nuestro método numérico funciona en casos sencillos y esto genera la suficiente confianza

para probarlos en ejemplos más complicados cuya solución es conocida de manera que, si estos resultasen ser útiles, podríamos estar lo suficientemente seguros de las capacidades que ofrezca el método y así poder aplicarlo distintos problemas cuya solución pueda no ser tan sencilla. Por otro lado pudimos mostrar que el programa *tqli* extraído de [25] obtiene resultados menos precisos en mayor tiempo de ejecución que aquellos obtenidos con *eigs* de la paquetería *LAPACK* incluida en Julia de manera que nos limitaremos a usar el último el resto del trabajo esperando así obtener mejores resultados. Finalmente podemos señalar que la cantidad de puntos necesarios para obtener una precisión de tres cifras después del punto decimal en los tres primeros eigenvalores cambia mucho, ya que para las condiciones de Dirichlet se requieren alrededor de 1000 puntos sin embargo para las condiciones de Neumann se requieren menos de 2000 puntos y para las condiciones cíclicas esta cantidad de puntos en la malla parece no ser suficiente. Con esto podemos expandir los límites que hemos explorado hasta este momento en nuestro método numérico buscando un problema un poco más complejo que nos permita comparar los resultados obtenidos con aquellos ya conocidos y además poner a prueba lo aprendido con los resultados obtenidos.

Ecuación de Helmholtz en dos dimensiones con geometría circular

La ecuación de Bessel tiene relevancia matemática y física debido a que aparece en múltiples problemas donde, mediante el método de separación de variables se busca resolver la ecuación de Laplace o Helmholtz. En física este tipo de problemas se presentan cuando se busca resolver problemas ondulatorios [22–24, 27, 28].

3.1. Solución analítica

Consideremos el problema de una membrana circular de radio ρ_0 que puede vibrar, sujeta a una pared rígida en su perímetro. Ya que está sujeta a una pared rígida, cuando las perturbaciones en la membrana alcancen este límite desaparecerán. Como podemos notar tenemos el problema de una membrana oscilante y entonces podemos describirlo mediante la ecuación de onda [23, 24]

$$\nabla^2 U(\tilde{\mathbf{r}}, t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 U(\tilde{\mathbf{r}}, t)}{\partial t^2} \quad (3.1)$$

donde c es la velocidad de propagación de una onda en el medio. Es conveniente estudiar el problema en coordenadas cilíndricas debido a la geometría del problema. Para resolver este problema consideremos la separación de variables $U(\tilde{\mathbf{r}}, t) = \Psi(\tilde{\mathbf{r}})T(t)$ [23, 24], de modo que si introducimos en (3.1) obtendremos

$$\frac{\nabla^2 \Psi(\tilde{\mathbf{r}})}{\Psi(\tilde{\mathbf{r}})} = \frac{1}{T(t)c^2} \frac{\partial^2 T(t)}{\partial t^2}$$

ya que un lado de la ecuación sólo depende de las variables espaciales y el otro sólo de la variable temporal, ambos cocientes son iguales a una constante que por conveniencia denotaremos como $-\tau^2$ de modo que podamos separar el problema principal de una complejidad mayor en 2

CAPÍTULO 3. ECUACIÓN DE HELMHOLTZ EN DOS DIMENSIONES CON GEOMETRÍA CIRCULAR

problemas que nos resultarán más sencillos de resolver. Por un lado tenemos la ecuación para la variable temporal

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + (\tau c)^2\right) T(t) = 0$$

que tiene una solución sencilla oscilatoria que podemos escribir de la siguiente manera:

$$T(t) = T_0 e^{\pm i\omega t} \quad \text{con} \quad \omega = \tau c \quad (3.2)$$

Por otro lado la ecuación para la parte espacial resulta ser la ecuación de Helmholtz, que presentamos en coordenadas polares debido a la naturaleza del problema

$$\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho}\right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}\right) \Psi(\rho, \phi) = -k^2 \Psi(\rho, \phi) \quad (3.3)$$

repitiendo el proceso anterior, hacemos la separación de variables de la siguiente manera $\Psi(\rho, \phi) = R(\rho)\varphi(\phi)$ y obtenemos una ecuación para la parte angular

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + n^2\right) \varphi(\phi) = 0, \quad (3.4)$$

y otra para la parte radial

$$\left(-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho}\right) + \frac{n^2}{\rho^2}\right) R(\rho) = k^2 R(\rho), \quad (3.5)$$

esto podemos reescribirlo como

$$\rho^2 R''(\rho) + \rho R'(\rho) + ((k\rho)^2 - n^2) R(\rho) = 0.$$

Ahora, haciendo el cambio de variable $s = k\rho$ llegamos a la siguiente ecuación

$$s^2 R''(s) + s R'(s) + (s^2 - n^2) R(s) = 0, \quad (3.6)$$

que es conocida como la ecuación de Bessel. La solución a (3.4) es similar a las solución correspondiente a la ecuación para t

$$\Phi(\phi) = \Phi_0 e^{\pm in\phi}. \quad (3.7)$$

Sin embargo, en este caso la geometría del problema nos lleva a esperar que la solución en esta coordenada sea periódica cada 2π radianes, de modo que debe cumplirse

$$\begin{aligned} 1 &= e^0 = e^{in2\pi} \text{ entonces} \\ 1 &= \cos(2n\pi) \text{ por lo tanto} \\ n &= 0, 1, 2, 3, \dots \end{aligned}$$

Para resolver la ecuación (3.6) consideremos, según sugiere el método de Frobenius [21, 23]

$$R(s) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m s^{r+m}$$

que al introducirlo en (3.6) obtenemos

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^{\infty} a_m(r+m)(r+m-1)s^{r+m} + \sum_{m=0}^{\infty} a_m(r+m)s^{r+m} + \\ + \sum_{m=0}^{\infty} a_m s^{r+m+2} - n^2 \sum_{m=0}^{\infty} a_m s^{r+m} = 0 \end{aligned}$$

entonces

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^{\infty} a_m(r+m)(r+m-1)s^{r+m} + \sum_{m=0}^{\infty} a_m(r+m)s^{r+m} + \\ + \sum_{m=2}^{\infty} a_{m-2}s^{r+m} - n^2 \sum_{m=0}^{\infty} a_m s^{r+m} = 0 \end{aligned}$$

Si escribimos explícitamente los términos para $m = 1, 2$ para los elementos de la ecuación que comienzan en $m = 0$ e igualamos los términos de s^r, s^{r+1}, s^{r+m} a 0 obtenemos el sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} (r^2 - n^2)a_0 &= 0 \\ ((r+1)^2 - n^2)a_1 &= 0 \\ ((r+m)^2 - n^2)a_m + a_{m-2} &= 0 \end{aligned} \tag{3.8}$$

de donde podemos obtener las condiciones para los elementos de las ecuaciones en el sistema. De la primera de ellas obtenemos que $r = \pm n$, si tomamos $r = n$, entonces

$$a_m = -\frac{a_{m-2}}{(m+n)^2 - n^2} = -\frac{a_{m-2}}{m(m+2n)}. \tag{3.9}$$

Si la primera ecuación de la relación obtenida para a_0 es cierta, entonces $a_1 = 0$ y por la relación de recurrencia para a_m se obtiene que en $m = 3$ es

$$a_3 = \frac{-a_1}{3(3+2n)} = \frac{0}{3(3+2n)} = 0$$

de aquí podemos notar que $a_1 = a_3 = a_5 = \dots = a_m = 0$ si m es impar. Si $m = 2j$ y evaluamos $j = 1, 2, \dots, n$ es sencillo obtener la expresión

$$a_m = \frac{a_0(-1)^m}{2^{2m}m!(1+n)(2+n)\dots(m+n)}$$

y sustituyendo esto en la solución para $R(s)$

$$R(s) = a_0 \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{2^{2m}m!(1+n)(2+n)\dots(m+n)} s^{2m+n}$$

debido a que a_0 es arbitrario podemos elegir¹ $a_0 = \frac{1}{2^n \Gamma(n+1)}$ y aplicando la propiedad de la función gamma $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$ obtenemos

$$\Gamma(m+n+1) = \Gamma(n+1)(1+n)(2+n)\dots(m+n)$$

¹Elegimos este valor ya que nos permite reordenar los elementos de manera que obtengamos finalmente una forma común de la función de Bessel como se hace en [29].

CAPÍTULO 3. ECUACIÓN DE HELMHOLTZ EN DOS DIMENSIONES CON GEOMETRÍA CIRCULAR

lo que finalmente nos lleva a la forma estándar de la solución de la ecuación de Bessel o dicho de otro modo a la función de Bessel de orden n

$$R(s) = J_n(s) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!(m+n)!} \left(\frac{s}{2}\right)^{2m+n} \quad (3.10)$$

Una de las propiedades de las funciones de Bessel es que tiene oscilaciones con infinitos ceros a lo largo del eje de la variable independiente [21, 23, 30]. De manera que, de acuerdo a la condición de frontera en $\rho = \rho_0$ se tiene

$$\begin{aligned} J_n(s) = J_n(k\rho_0) = 0 \text{ entonces} \\ k = \frac{j_{n,l}}{\rho_0} \end{aligned} \quad (3.11)$$

donde $j_{n,l}$ es el l -ésimo cero de la función de Bessel de orden n . Esto es importante porque los valores de k tienen una estrecha relación con nuestro problema numérico, ya que, estos son los eigenvalores que calcularemos numéricamente. Finalmente la solución general a (3.1) es

$$\begin{aligned} \Psi_{n,l}(\rho, \phi, t) = A_{n,l} T_0 J_n\left(\frac{j_{n,l}\rho}{\rho_0}\right) e^{in\phi} e^{i\omega_{n,l}t} \\ \text{con } n = 0, 1, 2, \dots \\ \text{y } l = 1, 2, 3, \dots, n-1 \end{aligned}$$

donde $A_{n,l}$ es la amplitud de cada modo de vibración. Centraremos nuestra atención en (3.5) cuya solución es

$$Q_{n,l}(\rho, \phi) = A_{n,l} J_n\left(\frac{j_{n,l}\rho}{\rho_0}\right) e^{-in\phi} \quad (3.12)$$

La razón de centrarnos en este caso en específico es debido a que por un lado esta es la ecuación de Helmholtz en el plano polar, y nuevamente podemos comparar fácilmente nuestros resultados numéricos con otros ya estudiados previamente y de esta manera podremos mostrar que nuestro método reporta datos reproducibles. Por otro lado este tratamiento nos ayuda a enfocar nuestros esfuerzos en un caso más simple de la geometría con la que se desea trabajar.

3.2. Solución numérica

En el capítulo anterior resolvimos numérica y analíticamente la ecuación de Helmholtz en una dimensión, mientras que en la sección anterior resolvimos analíticamente la ecuación de Helmholtz en dos dimensiones con geometría circular. Hacer el desarrollo numérico de (3.3) sería más directo, sin embargo, al centrarnos en la parte radial encontramos la ecuación de Bessel; esta posee una solución analítica cuyas propiedades están ampliamente documentadas permitiéndonos nuevamente establecer comparaciones entre los resultados obtenidos y los existentes en la literatura, sin mencionar que es una solución numérica parcial al problema dos dimensional. Por otro lado, la solución numérica de este problema nos permite explorar la geometría circular

CAPÍTULO 3. ECUACIÓN DE HELMHOLTZ EN DOS DIMENSIONES CON
GEOMETRÍA CIRCULAR

con nuestro método de cálculo, además, analizar los resultados obtenidos generará una mayor confianza en nuestro método. Finalmente la solución de esta manera nos da la posibilidad de poner en práctica lo aprendido en el capítulo anterior y de esta manera crear una conexión con el problema numérico estudiado previamente y con el que se desea estudiar posteriormente. Ya que deseamos hacer un tratamiento numérico del problema, de tal manera que podamos resolverlo computacionalmente es necesario hacer una discretización de

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial J}{\partial \rho} \right) + \frac{n^2}{\rho^2} J = k^2 J \quad (3.13)$$

El procedimiento para obtener una ecuación discretizada es muy similar al presentado anteriormente [17]. Primero multiplicamos por J^* e integramos la ecuación con respecto a ρ y ϕ . Considerando que trabajamos en coordenadas polares desde un radio 0 hasta el radio R_0 obtenemos:

$$\int_0^{R_0} \left\{ -J^* \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial J}{\partial \rho} \right) + \frac{n^2}{\rho^2} J^* J \right\} \rho d\rho = \int_0^{R_0} k^2 J^* J \rho d\rho$$

integrando por partes el primer término de la ecuación tomando $u = J^*$ y $dv = \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial J}{\partial \rho} \right) d\rho$ tenemos

$$-\int_0^{R_0} J^* \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial J}{\partial \rho} \right) d\rho = \left\{ J^* \rho \frac{\partial J}{\partial \rho} \right\}_0^{R_0} - \int_0^{R_0} \left\{ \frac{\partial J^*}{\partial \rho} \frac{\partial J}{\partial \rho} \right\} \rho d\rho$$

debido a las condiciones de frontera $J^*(R_0) = 0$ ó $\left. \frac{\partial J}{\partial \rho} \right|_{R_0} = 0$ lo que también aplica para $\rho = 0$.

Con esto obtenemos

$$\int_0^{R_0} \left\{ \frac{\partial J^*}{\partial \rho} \frac{\partial J}{\partial \rho} + \frac{n^2}{\rho^2} J^* J \right\} \rho d\rho = \int_0^{R_0} k^2 J^* J \rho d\rho \quad (3.14)$$

y como podemos observar el funcional dentro de la integral es hermitiano. De manera similar al capítulo anterior realizaremos la discretización considerando diferencias finitas en la ecuación anterior de la siguiente manera

$$\rho \rightarrow \rho_i, \quad d\rho \rightarrow \rho_{i+1/2} - \rho_{i-1/2}, \quad \frac{\partial J}{\partial \rho} \rightarrow \frac{J_{i+1/2} - J_{i-1/2}}{\rho_{i+1/2} - \rho_{i-1/2}} \quad (3.15)$$

Ha de recordarse que se eligió esta discretización debido a que es posible modificar las divisiones deseadas en una región específica donde sea necesaria una mayor precisión. De esta manera, el funcional dentro de la integral en la ecuación (3.14) se convierte en

$$\begin{aligned} & \frac{(J_{i+1/2}^* - J_{i-1/2}^*)(J_{i+1/2} - J_{i-1/2})}{\rho_{i+1/2} - \rho_{i-1/2}} \rho_i \\ & + \frac{n^2}{\rho_i} J_i^* J_i (\rho_{i+1/2} - \rho_{i-1/2}) = k^2 J_i^* J_i \rho_i (\rho_{i+1/2} - \rho_{i-1/2}) \end{aligned} \quad (3.16)$$

CAPÍTULO 3. ECUACIÓN DE HELMHOLTZ EN DOS DIMENSIONES CON GEOMETRÍA CIRCULAR

Para saber cual es el mejor funcional que optimiza la integral anterior calculamos $\frac{\partial \text{Funcional}}{\partial J_i^*} = 0$ que optimiza la integral anterior

$$\frac{\rho_{i-1/2}}{\rho_i - \rho_{i-1}}(J_i - J_{i-1}) - \frac{\rho_{i+1/2}}{\rho_i - \rho_{i-1}}(J_{i+1} - J_i) + \frac{n^2}{\rho_i}(\rho_{i+1/2} - \rho_{i-1/2})\Psi_i = k^2 \rho_i(\rho_{i+1/2} - \rho_{i-1/2})J_i.$$

Reagrupado los términos con J_{i+1} , J_i y J_{i-1} y sustituyendo $\rho_{i\pm 1/2}$ se obtiene la siguiente relación matricial:

$$\left[\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} + \frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} + \frac{n^2}{\rho_i^2} \rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1}) \right] J_i - \frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} J_{i-1} + \frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} J_{i+1} = k^2 \rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1}) J_i. \quad (3.17)$$

Esta relación tiene la forma

$$\mathbb{H}\vec{J} = k^2\mathbb{D}\vec{J},$$

donde \mathbb{H} es la relación matricial, \vec{J} es la representación discreta de la función de onda J y \mathbb{D} es la matriz diagonal del lado derecho de la igualdad [17]. Esta última matriz puede ser eliminada mediante una transformación $\vec{J} = \mathbb{L}\vec{\Phi}$. Con ello se obtiene que la relación anterior se convierte en

$$\mathbb{H}\mathbb{L}\vec{\Phi} = k^2\mathbb{D}\mathbb{L}\vec{\Phi}.$$

Si multiplicamos esta ecuación por \mathbb{L}^\dagger obtenemos la siguiente relación

$$\mathbb{L}^\dagger\mathbb{H}\mathbb{L}\vec{\Phi} = k^2\mathbb{L}^\dagger\mathbb{D}\mathbb{L}\vec{\Phi}.$$

Aquí pedimos que la transformación cumpla $\mathbb{L}^\dagger\mathbb{D}\mathbb{L} = \mathbb{I}$, es decir, que sea la identidad. Esto nos proporciona el siguiente desarrollo para la multiplicación de matrices del lado derecho de la ecuación (3.17)

$$\mathbb{L}^\dagger\mathbb{D}\mathbb{L}\mathbb{L}^{-1} = \mathbb{L}^{-1} \rightarrow \mathbb{L}\mathbb{L}^\dagger = \mathbb{I} \rightarrow \mathbb{L}^2\mathbb{D} = \mathbb{I}$$

donde se pide que $\mathbb{L}^\dagger = \mathbb{L}$ es decir, la transformación tiene que ser simétrica o más en general, hermitiana. En el caso anterior se obtiene que \mathbb{L} tiene que ser tal que $\mathbb{L}^2 = \mathbb{D}^{-1}$, dado que $\mathbb{D} = \delta_{ij}\rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})$, entonces la matriz que estamos buscando es

$$\mathbb{L} = \frac{\delta_{ii}}{\sqrt{\rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})}}.$$

Esta matriz es evidentemente diagonal y con ello se obtiene que el problema de eigenvalores se transforma en $\mathbb{L}\mathbb{H}\mathbb{L}\vec{\Phi} = k^2\vec{\Phi}$ y al hacer la multiplicación de matrices obtenemos un nuevo

CAPÍTULO 3. ECUACIÓN DE HELMHOLTZ EN DOS DIMENSIONES CON
GEOMETRÍA CIRCULAR

hamiltoniano $\tilde{\mathbb{H}} = \mathbb{L}\mathbb{H}\mathbb{L}$. El desarrollo de esta multiplicación de matrices se ilustra a continuación:

$$\begin{pmatrix} L_{11} & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & L_{i-1,i-1} & & & & \\ & & & L_{ii} & & & \\ & & & & L_{i+1,i+1} & & \\ & & & & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & & & & & \\ H_{21} & \ddots & \ddots & & & & \\ & \ddots & H_{i-1,i-1} & H_{i-1,i} & & & \\ & & H_{i,i-1} & H_{ii} & H_{i,i+1} & & \\ & & & H_{i+1,i} & H_{i+1,i+1} & & \end{pmatrix} \\ \times \begin{pmatrix} L_{11} & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & L_{i-1,i-1} & & & & \\ & & & L_{ii} & & & \\ & & & & L_{i+1,i+1} & & \end{pmatrix} = \\ \begin{pmatrix} H_{11}L_{11}^2 & H_{12}L_{22}L_{11} & & & & & \\ H_{21}L_{11}L_{22} & \ddots & \ddots & & & & \\ & \ddots & & H_{i-1,i-1}L_{i-1,i-1}^2 & H_{i-1,i}L_{ii}L_{i-1,i-1} & & \\ & & & H_{i,i-1}L_{i-1,i-1}L_{ii} & H_{ii}L_{ii}^2 & H_{i,i+1}L_{i+1,i+1}L_{ii} & \\ & & & H_{i+1,i}L_{ii}L_{i+1,i+1} & H_{i+1,i+1}L_{i+1,i+1}^2 & & \end{pmatrix}$$

Como se puede observar, los elementos de la diagonal principal no se ven afectados al hacer la multiplicación de matrices. Sin embargo, los elementos fuera de la diagonal si se ven afectados al recorrerse el índice de la matriz \mathbb{L} , y de esta manera se obtiene la siguiente relación matricial

$$\begin{aligned} & \left\{ \frac{1}{\rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})} \left[\left(\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} \right) (1 - \delta_{1i}\delta_{0n}) + \frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right] + \frac{n^2}{\rho_i^2} \right\} J_i \\ & - \frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{(\rho_{i+1} - \rho_i)\sqrt{\rho_i\rho_{i+1}(\rho_{i+2} - \rho_i)(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})}} J_{i+1} \\ & - \frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{(\rho_i - \rho_{i-1})\sqrt{\rho_i\rho_{i-1}(\rho_i - \rho_{i-2})(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})}} J_{i-1} = k^2 J_i. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Se puede observar que la matriz es simétrica, el término $(1 - \delta_{1i}\delta_{0n})$ hace que el elemento multiplicado se anule para cumplir con la condición a la frontera que en $i = 1$ y con $n = 0$ la función solución debe tener derivada cero en el origen; en caso contrario, tanto en el origen como en la frontera $\rho_N = R_0$ la función solución debe ser cero.

3.3. Comparación entre soluciones analíticas y numéricas

En esta ocasión hemos utilizado sólo el programa *eigs* debido a que, como vimos anteriormente, este resulto una mejor opción para el cálculo de eigenvalores. En la Figura 3.2 se grafican los eigenvalores contra el número de puntos en la malla. Buscamos nuevamente una precisión de al menos tres cifras a la derecha del punto decimal que se cumpla para al menos los primeros tres eigenvalores. Podemos apreciar en las Figuras 3.2, 3.3, 3.4 y 3.5 que todos los eigenvalores se encuentran más alejados del valor teórico que aquellos de orden cero, es decir a mayor orden una mayor diferencia con el valor propio esperado es encontrada. La Figura 3.1 muestra el espectro de eigenvalores para las primeras cuatro funciones de Bessel. La mayor o menor oscilación de cada eigenfunción repercute en el número de veces que corta esta al eje, lo que afecta directamente la cantidad de eigenvalores encontrados, ya que, las eigenfunciones de mayor orden poseen mayor oscilación en el mismo intervalo y como consecuencia de esto cortan con mayor frecuencia al eje. Esto también se evidencia en la dificultad que posee el programa para encontrar eigenvalores de ordenes mayores ya que como vimos en el capítulo anterior a mayor oscilación una mayor cantidad de puntos es necesaria para aproximar la eigenfunción y por esto la estimación numérica del eigenvalor resulta afectada. La figura 3.1 presenta todos los eigenvalores alineados al lado derecho de la gráfica en una vertical para evidenciar la relativa cercanía de ciertos valores y el orden en que podríamos esperar encontrarlos de no ser posible fijar la variable angular y no poder elegir el orden de la función de Bessel.

El tratamiento con geometría circular nos ha permitido mostrar que las capacidades de nuestro método numérico no se limitan a ejemplos sencillos y pueden aplicarse a problemas de mayor complejidad reproduciendo los resultados con suficiente precisión, además, nos ha mostrado una estructura en el comportamiento de los eigenvalores y su estrecha relación con las eigenfunciones. Finalmente nos ha permitido resolver parcialmente el problema dos dimensional de Helmholtz y gracias a esto podemos tener una idea de los resultados que esperamos encontrar si deseáramos resolver este problema. Ya que el problema es similar y analíticamente conocemos la solución, usando lo aprendido gracias a la Figura 3.1 podríamos esperar que los ceros de Bessel aparezcan en cierto orden relativo a la magnitud del eigenvalor.

CAPÍTULO 3. ECUACIÓN DE HELMHOLTZ EN DOS DIMENSIONES CON GEOMETRÍA CIRCULAR

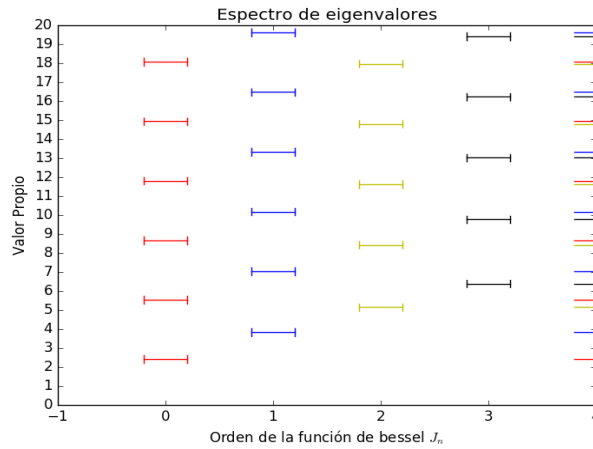


Figura 3.1: Espectro de los primeros eigenvalores para J_0 , J_1 , J_2 y J_3 , estos aparecen alineados según su valor y orden. En el lado derecho de la gráfica se muestran todos los valores propios alineados en una vertical en la que se puede apreciar el valor creciente de estos, sugiriendo una forma en la que estos podrían encontrarse de no tener libertad de elegir el orden de la función de Bessel.

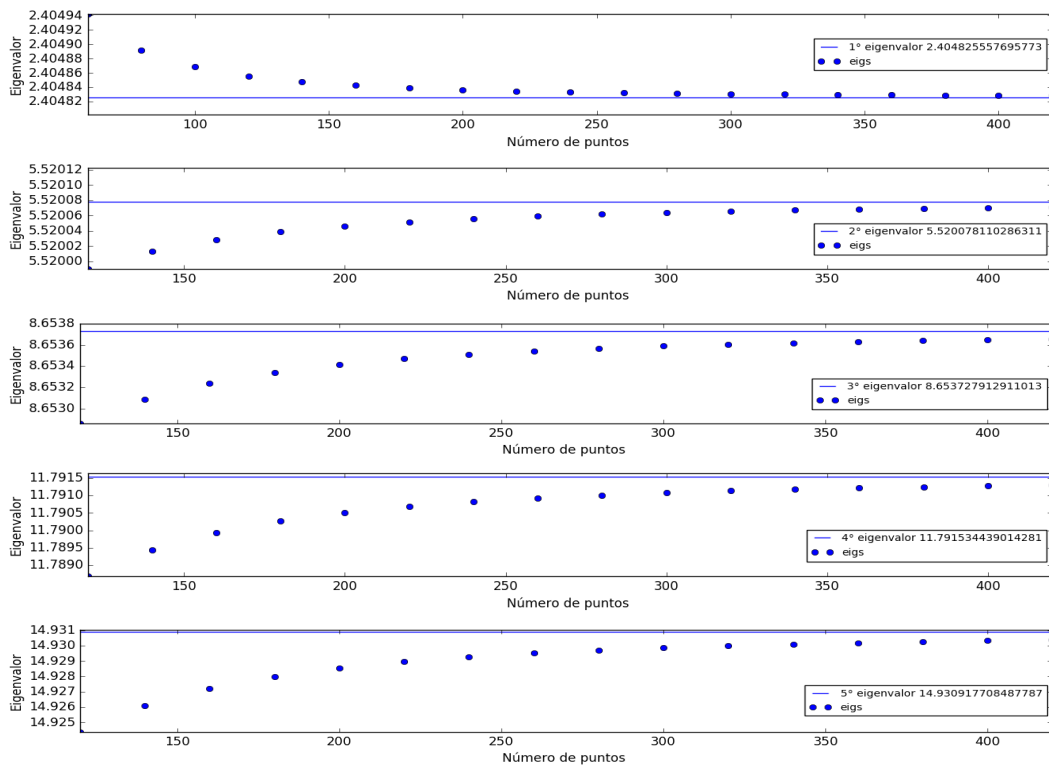


Figura 3.2: Evolución numérica con el número de puntos de los primeros cinco eigenvalores para J_0 . El valor esperado se representa por una línea azul, estos extraídos de [30].

CAPÍTULO 3. ECUACIÓN DE HELMHOLTZ EN DOS DIMENSIONES CON GEOMETRÍA CIRCULAR

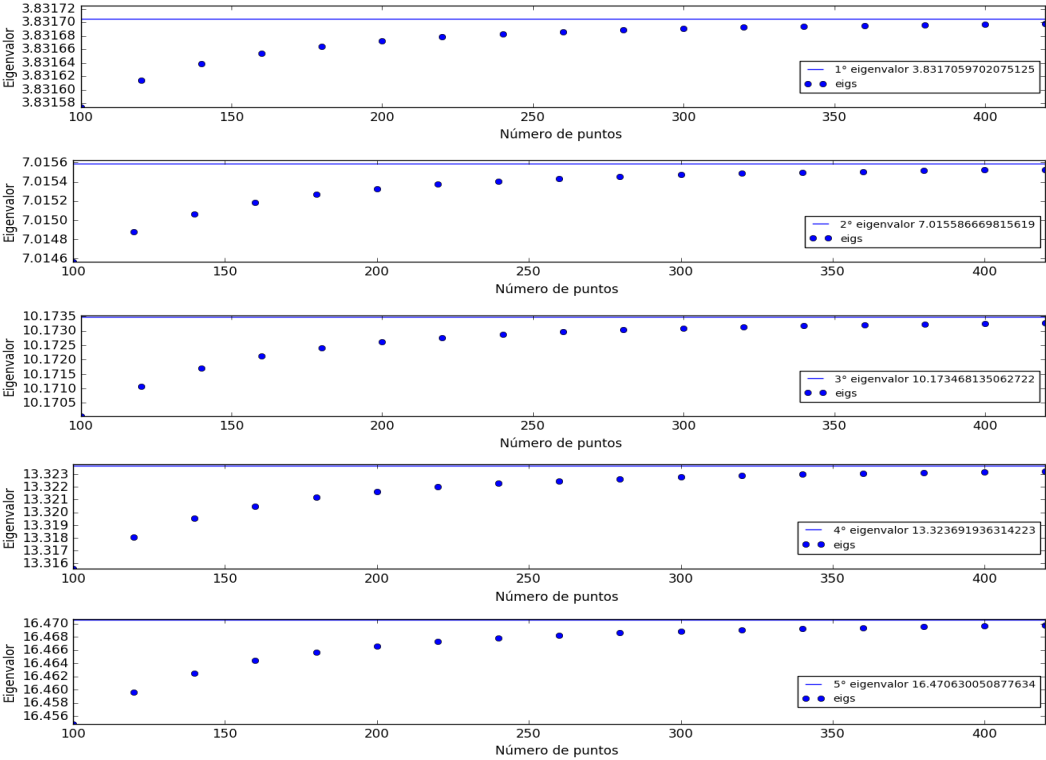


Figura 3.3: Evolución numérica con el número de puntos de los primeros cinco eigenvalores para J_1 . El valor esperado se representa por una línea azul, estos extraídos de [30].

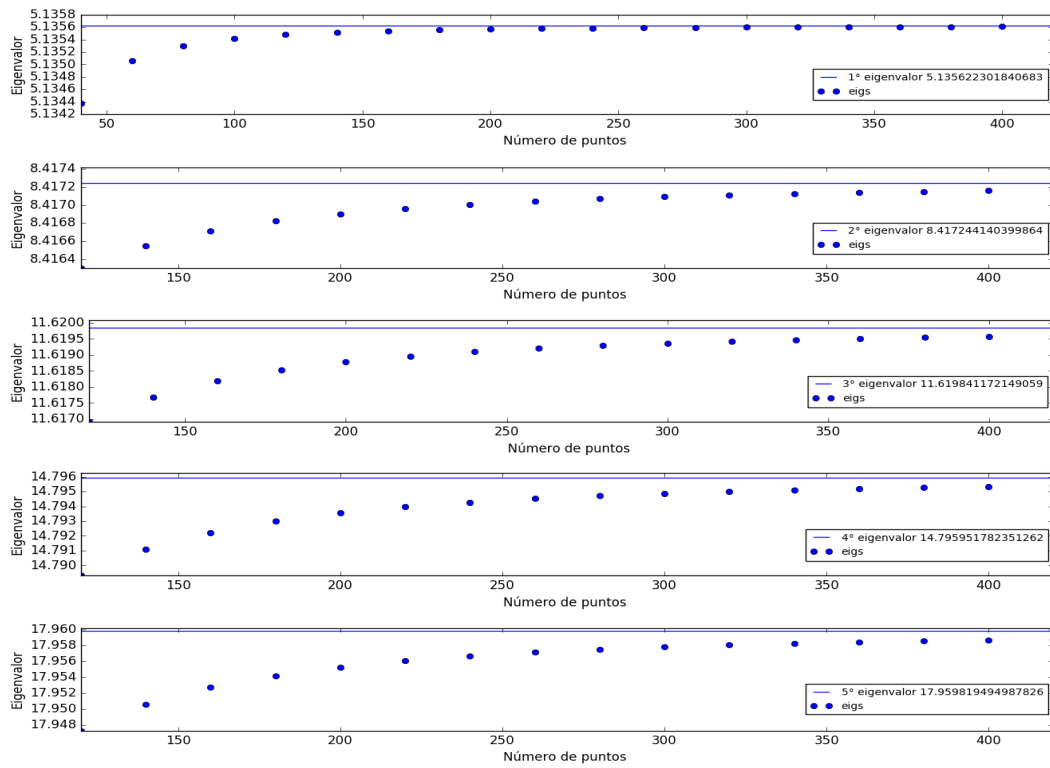


Figura 3.4: Evolución numérica con el número de puntos de los primeros cinco eigenvalores para J_2 . El valor esperado se representa por una línea azul, estos extraídos de [30].

CAPÍTULO 3. ECUACIÓN DE HELMHOLTZ EN DOS DIMENSIONES CON GEOMETRÍA CIRCULAR

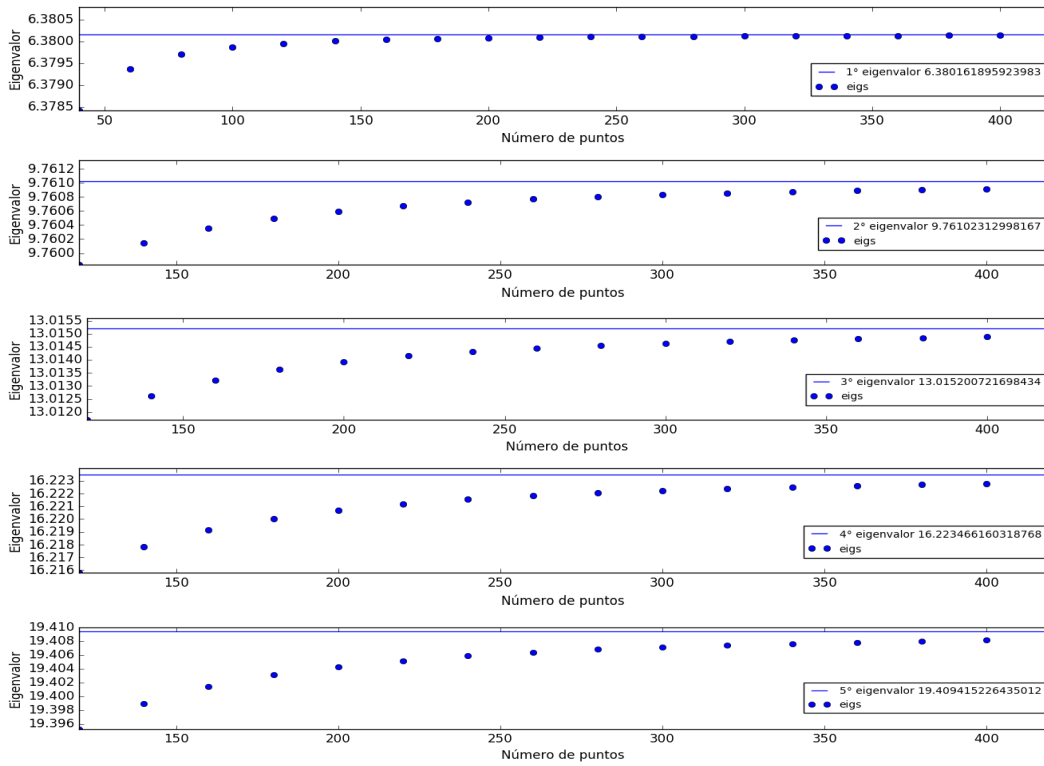


Figura 3.5: Evolución numérica con el número de puntos de los primeros cinco eigenvalores para J_3 . El valor esperado se representa por una línea azul, estos extraídos de [30].

Ecuación de Helmholtz en coordenadas polares

Una vez resuelto el problema en una dimensión por métodos numéricos resolveremos el problema numéricamente, pero ahora tomando en cuenta la variación angular cosa que no se hizo en el capítulo anterior. La omisión previa de la variable angular en el tratamiento numérico nos permitió simplificar el problema de tal manera que fuera posible desarrollar y verificar el método en geometría circular de una manera mas sencilla. Sin embargo, esto hizo imposible obtener la solución completa del problema bidimensional de manera que su aplicación a problemas más complejos quedo limitada. La inclusión de la variable angular en el tratamiento numérico elimina esta restricción y su tratamiento nos permitirá enfrentar problemas en dos dimensiones, en particular aquellos que se encuentren en una geometría polar, lo cual resulta útil, en particular, si se desea describir sistemas físicos reales en los cuales para encontrar una solución analítica se requiere un tratamiento matemático más elaborado.

4.1. Discretización de la coordenada radial y angular

Partiremos de la ecuación de Helmholtz en coordenadas polares

$$\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) Q(\rho, \phi) = -k^2 Q(\rho, \phi) \quad (4.1)$$

de la que buscamos una discretización que nos permita resolver numéricamente el problema a través de una ecuación matricial. Para hallar la relación matricial, procederemos de manera similar a como lo hemos hecho anteriormente. Primero multiplicamos por el conjugado de la función buscada e integramos respecto a las variables ρ y ϕ en el intervalo de definición,

$$\int_0^{\rho_0} \int_0^{2\pi} \left\{ \left(\frac{\Psi^*}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} \right) + \frac{\Psi^*}{\rho^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2} \right) \right\} \rho d\rho d\phi = - \int_0^{\rho_0} \int_0^{2\pi} k^2 \Psi^* \Psi \rho d\rho d\phi \quad (4.2)$$

para el primer término podemos integrar por partes respecto a ρ solamente y encontramos

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\rho_0} \Psi^* \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} \right) d\rho d\phi = - \int_0^{2\pi} \int_0^{\rho_0} \frac{\partial \Psi^*}{\partial \rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} \rho d\rho d\phi \quad (4.3)$$

donde hemos usado la condición en la frontera en $\rho = 0$ y $\rho = \rho_0$ para eliminar el primer término del lado derecho. Ahora notemos que

$$\frac{\partial}{\partial \phi} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial \phi} \right) = \frac{\partial \Psi^*}{\partial \phi} \frac{\partial \Psi}{\partial \phi} + \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2} \quad (4.4)$$

entonces

$$\begin{aligned} \int_0^{R_0} \left(\int_0^{2\pi} \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial^2 \rho} d\phi \right) \frac{1}{\rho} d\rho &= \int_0^{R_0} \left(\int_0^{2\pi} \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial \phi} \right) d\phi - \int_0^{2\pi} \frac{\partial \Psi^*}{\partial \phi} \frac{\partial \Psi}{\partial \phi} d\phi \right) \frac{1}{\rho} d\rho \\ &= \int_0^{R_0} \left(\left\{ \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial \phi} \right\}_0^{2\pi} - \int_0^{2\pi} \frac{\partial \Psi^*}{\partial \phi} \frac{\partial \Psi}{\partial \phi} d\phi \right) \frac{1}{\rho} d\rho \end{aligned} \quad (4.5)$$

El primer término desaparece debido a que $\Psi^*(\rho, 0) = \Psi^*(\rho, 2\pi)$ y $\frac{\partial \Psi}{\partial \phi} \Big|_{(\rho, 0)} = \frac{\partial \Psi}{\partial \phi} \Big|_{(\rho, 2\pi)}$, y finalmente obtenemos

$$\int_0^{R_0} \int_0^{2\pi} \left\{ \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial \rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial \Psi^*}{\partial \phi} \frac{\partial \Psi}{\partial \phi} \right) \rho d\rho d\phi \right\} = \int_0^{R_0} \int_0^{2\pi} \left\{ k^2 \Psi^* \Psi \rho d\rho d\phi \right\}. \quad (4.6)$$

La discretización será similar a la utilizada en casos anteriores

$$\begin{aligned} \rho &\rightarrow \rho_i, & d\rho &\rightarrow \rho_{i+\frac{1}{2}} - \rho_{i-\frac{1}{2}}, & d\phi &\rightarrow \phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_{j-\frac{1}{2}} \\ \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} &\rightarrow \frac{\Psi_{i+\frac{1}{2},j} - \Psi_{i-\frac{1}{2},j}}{\rho_{i+\frac{1}{2}} - \rho_{i-\frac{1}{2}}}, & \frac{\partial \Psi}{\partial \phi} &\rightarrow \frac{\Psi_{i,j+\frac{1}{2}} - \Psi_{i,j-\frac{1}{2}}}{\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_{j-\frac{1}{2}}} \end{aligned} \quad (4.7)$$

con $N + 2$ elementos en la parte radial y $M + 2$ elementos en la parte angular. La discretización se aplica al funcional dentro de corchetes a ambos lados de la ecuación anterior, de este modo obtenemos

$$\begin{aligned} &\sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N \left[\rho_i \left(\frac{\Psi_{i+\frac{1}{2},j}^* - \Psi_{i-\frac{1}{2},j}^*}{\rho_{i+\frac{1}{2}} - \rho_{i-\frac{1}{2}}} \right) \left(\frac{\Psi_{i+\frac{1}{2},j} - \Psi_{i-\frac{1}{2},j}}{\rho_{i+\frac{1}{2}} - \rho_{i-\frac{1}{2}}} \right) \right. \\ &+ \frac{1}{\rho_i} \left(\frac{\Psi_{i,j+\frac{1}{2}}^* - \Psi_{i,j-\frac{1}{2}}^*}{\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_{j-\frac{1}{2}}} \right) \left. \left(\frac{\Psi_{i,j+\frac{1}{2}} - \Psi_{i,j-\frac{1}{2}}}{\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_{j-\frac{1}{2}}} \right) \right] (\rho_{i+\frac{1}{2}} - \rho_{i-\frac{1}{2}}) (\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_{j-\frac{1}{2}}) \\ &= a^2 \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N \Psi_{i,j}^* \Psi_{i,j} \rho_i (\rho_{i+\frac{1}{2}} - \rho_{i-\frac{1}{2}}) (\phi_{i+\frac{1}{2}} - \phi_{i-\frac{1}{2}}) \end{aligned} \quad (4.8)$$

si desarrollamos los elementos del lado izquierdo de la ecuación entonces

$$\begin{aligned}
 & \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N (\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_{j-\frac{1}{2}}) \rho_i \frac{\Psi_{i+\frac{1}{2},j}^* \Psi_{i+\frac{1}{2},j} - \Psi_{i+\frac{1}{2},j}^* \Psi_{i-\frac{1}{2},j} - \Psi_{i-\frac{1}{2},j}^* \Psi_{i+\frac{1}{2},j} + \Psi_{i-\frac{1}{2},j}^* \Psi_{i-\frac{1}{2},j}}{\rho_{i+\frac{1}{2}} - \rho_{i-\frac{1}{2}}} \\
 & + \frac{(\rho_{i+\frac{1}{2}} - \rho_{i-\frac{1}{2}}) \Psi_{i,j+\frac{1}{2}}^* \Psi_{i,j+\frac{1}{2}} - \Psi_{i,j+\frac{1}{2}}^* \Psi_{i,j-\frac{1}{2}} - \Psi_{i,j-\frac{1}{2}}^* \Psi_{i,j+\frac{1}{2}} + \Psi_{i,j-\frac{1}{2}}^* \Psi_{i,j-\frac{1}{2}}}{\rho_i} \frac{\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_{j-\frac{1}{2}}}{\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_{j-\frac{1}{2}}} \\
 & = a^2 \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N \Psi_{i,j}^* \Psi_{i,j} \rho_i (\rho_{i+\frac{1}{2}} - \rho_{i-\frac{1}{2}}) (\phi_{i+\frac{1}{2}} - \phi_{i-\frac{1}{2}}) \quad (4.9)
 \end{aligned}$$

Nuevamente buscamos minimizar el funcional, para ello aplicamos $\frac{\partial}{\partial \Psi_{i,j}^*}$ y resolvemos la relación de recurrencia que se obtiene. En otras palabras debemos calcular $\frac{\partial \text{Funcional}}{\partial \Psi_{i,j}^*} = 0$ para optimizar la integral anterior considerando que $\rho_{i\pm\frac{1}{2}} = \frac{\rho_i + \rho_{i\pm 1}}{2}$, $\phi_{i\pm\frac{1}{2}} = \frac{\phi_i + \phi_{i\pm 1}}{2}$, $\Psi_{i\pm\frac{1}{2},j\pm\frac{1}{2}} = \Psi(\rho_{i\pm\frac{1}{2}}, \phi_{j\pm\frac{1}{2}})$. Ya que los índices a derivar se realizan respecto al término i debemos desplazar el índice en cada valor derivado, lo que afectará a los términos que multipliquen el elemento a derivar y estén relacionados con el término i . Debido a esto tendremos distintas contribuciones a nuestra relación de recurrencia, dos cuando el índice a derivar es $i' = i - 1/2, j$ o $i' = i + 1/2, j$ y otras dos cuando se debe derivar $i, j' = j + 1/2$ o $i, j' = j - 1/2$ para el resto basta con utilizar $i' = i, j' = j$. Con ello se obtiene la siguiente relación

$$\begin{aligned}
 & \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N \left\{ \left(\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} \right) (\phi_{j+1} - \phi_{j-1}) + \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) (\phi_{j+1} - \phi_{j-1}) \right. \\
 & \quad \left. + 2 \left(\frac{\rho_{i+1} - \rho_{i-1}}{(\phi_j - \phi_{j-1}) \rho_i} \right) + 2 \left(\frac{\rho_{i+1} - \rho_{i-1}}{(\phi_{j+1} - \phi_j) \rho_i} \right) \right\} \Psi_{i,j} \\
 & - \left(\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} \right) (\phi_{j+1} - \phi_{j-1}) \Psi_{i-1,j} - \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) (\phi_{j+1} - \phi_{j-1}) \Psi_{i+1,j} \\
 & - 2 \left(\frac{\rho_{i+1} - \rho_{i-1}}{(\phi_j - \phi_{j-1}) \rho_i} \right) \Psi_{i,j-1} - 2 \left(\frac{\rho_{i+1} - \rho_{i-1}}{(\phi_{j+1} - \phi_j) \rho_i} \right) \Psi_{i,j+1} \\
 & = a^2 \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N \Psi_{i,j} \rho_i (\rho_{i+1} - \rho_{i-1}) (\phi_{j+1} - \phi_{j-1}) \quad (4.10)
 \end{aligned}$$

Ahora buscamos reescribir la ecuación (4.10) de tal manera que podamos obtener una ecuación matricial que nos permita la solución numérica del problema. Para ello consideremos ordenar los elementos de Ψ en un vector de la siguiente manera

$$\vec{\Psi} = (\Psi_{1,1}, \Psi_{1,2}, \dots, \Psi_{1,M}, \Psi_{2,1}, \Psi_{2,2}, \dots, \Psi_{2,M}, \dots, \Psi_{N,1}, \Psi_{N,2}, \dots, \Psi_{N,M}). \quad (4.11)$$

Como podemos apreciar, este es un vector de $N \times M$ elementos. Sin embargo, trabajar con esta notación se vuelve confuso rápidamente, de manera que, si consideramos la siguiente expresión $s(i, j) = (i - 1)M + j$, al introducir distintos valores a i, j obtendremos distintos valores de s

$$s(1, 1) = 1 \quad s(1, 2) = 2 \quad \dots \quad s(5, 1) = 4M + 1 \quad s(5, 2) = 4M + 2 \quad \text{etc.} \quad (4.12)$$

Sabemos que valor corresponde a cada par i, j , entonces podemos saber de donde viene un cierto elemento s ya que $i = 1$ se asocia a $s = 0M + j$, $i = 2$ se asocia a $s = M + j$, ..., $i = M$ se asocia a $s = (N - 1)M + j$, el máximo de elementos que tendremos se produce cuando $i = N$ y $j = M$ de modo que $s = (N - 1)M + M = N \times M - M + M = N \times M$ [17]. Supongamos por ejemplo que $N = 30$ y $M = 20$ entonces tendremos a lo más $N \times M = 20 \times 30 = 600$ elementos divididos en 30 secciones de 20 elementos, de esta manera podremos expresar el vector como $\vec{\Psi} = (\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_M, \Psi_{M+1}, \Psi_{M+2}, \dots, \Psi_{2M}, \dots, \Psi_{N \times M - M + 1}, \Psi_{N \times M - M + 2}, \dots, \Psi_{N \times M})$ y expresar la relación de una manera más clara

$$A_{s,s}\Psi_s + A_{s,s+M}\Psi_{s+M} + A_{s,s-M}\Psi_{s-M} + A_{s,s+1}\Psi_{s+1} + A_{s,s-1}\Psi_{s-1} = D_{s,s}\Psi_s \quad (4.13)$$

donde

$$\begin{aligned} A_{s(i,j),s(i,j)} &= \left(\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} \right) (\phi_{j+1} - \phi_{j-1}) + \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) (\phi_{j+1} - \phi_{j-1}) \\ &\quad + 2 \left(\frac{\rho_{i+1} - \rho_{i-1}}{(\phi_j - \phi_{j-1})\rho_i} \right) + 2 \left(\frac{\rho_{i+1} - \rho_{i-1}}{(\phi_{j+1} - \phi_j)\rho_i} \right) \\ A_{s(i,j),s(i,j)-M} &= - \left(\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} \right) (\phi_{j+1} - \phi_{j-1}) \\ A_{s(i,j),s(i,j)+M} &= - \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) (\phi_{j+1} - \phi_{j-1}) \\ A_{s(i,j),s(i,j)-1} &= -2 \left(\frac{\rho_{i+1} - \rho_{i-1}}{(\phi_j - \phi_{j-1})\rho_i} \right) \\ A_{s(i,j),s(i,j)+1} &= -2 \left(\frac{\rho_{i+1} - \rho_{i-1}}{(\phi_{j+1} - \phi_j)\rho_i} \right) \\ D_{s(i,j),s(i,j)} &= \rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})(\phi_{j+1} - \phi_{j-1}) \end{aligned} \quad (4.14)$$

Ahora podemos reescribir todo como un sistema de ecuaciones de manera sencilla pero debemos tener ciertas consideraciones antes de escribir explícitamente los términos de las ecuaciones. Debemos tener cuidado en la forma en la que se asocian los términos, ya que, debido a las condiciones de frontera puede caerse en el error de intentar calcular elementos ϕ_{-1} ó ϕ_{M+2} y estos no se encuentran explícitamente en nuestra malla, pero hay que recordar que se ha hecho una discretización del espacio físico real, de modo que los valores elegidos representen pequeñas secciones de un área. Entonces en una región circular estos valores estarán perfectamente definidos ya que los valores se repiten periódicamente. Una vez hecha esta aclaración podemos considerar las condiciones de frontera tipo Neumann-cíclicas

$$\left. \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} \right|_{\rho=0} = 0, \quad \Psi(R, \phi) = 0 \text{ y } \Psi(\rho, 0) = \Psi(\rho, 2\pi) \quad (4.15)$$

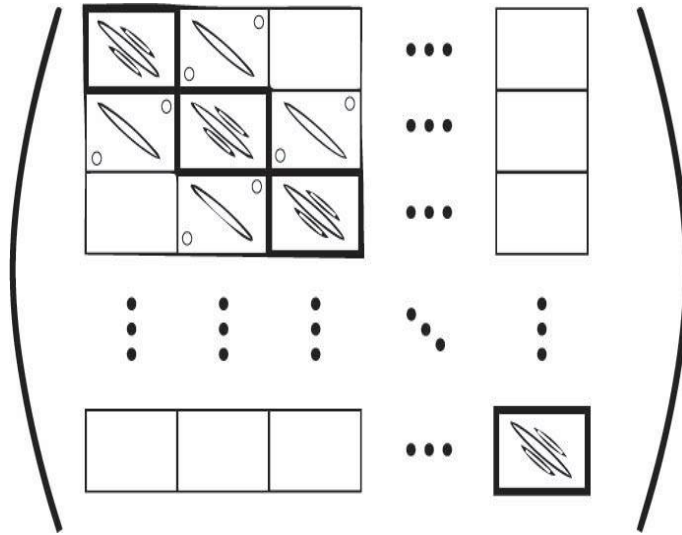
que numéricamente se representan como:

$$\Psi_{s(1,j)-M} = \Psi_{s(1,j)}, \quad \Psi_{s(N,j)} = 0 \text{ y } \Psi_{s(i,1)-1} = \Psi_{s(i,M)+1} \quad (4.16)$$

esto se expresa en el sistema de ecuaciones de la siguiente manera

$$\begin{aligned}
 (A_{1,1} + A_{1,1-M})\Psi_1 + A_{1,2}\Psi_2 + A_{1,0}\Psi_M + A_{1,1+M}\Psi_{1+M} &= a^2 D_{1,1}\Psi_1 \\
 (A_{2,2} + A_{1,2-M})\Psi_2 + A_{2,3}\Psi_3 + A_{2,1}\Psi_1 + A_{2,2+M}\Psi_{2+M} &= a^2 D_{2,2}\Psi_2 \\
 &\vdots \\
 (A_{M,M} + A_{1,0})\Psi_M + A_{M,M+1}\Psi_{M+1} + A_{M,M-1}\Psi_{M-1} + A_{M,2M}\Psi_{2M} &= a^2 D_{M,M}\Psi_M \\
 A_{M+1,M+1}\Psi_{M+1} + A_{M+1,2M+1}\Psi_{2M+1} + A_{M+1,M+2}\Psi_{M+2} \\
 + A_{M+1,1}\Psi_1 + A_{M+1,M}\Psi_{2M} &= a^2 D_{M+1,M+1}\Psi_{M+1} \\
 A_{M+2,M+2}\Psi_{M+2} + A_{M+2,2M+2}\Psi_{2M+2} + A_{M+2,M+3}\Psi_{M+3} \\
 + A_{M+2,2}\Psi_2 + A_{M+2,M+1}\Psi_{M+1} &= a^2 D_{M+2,M+2}\Psi_{M+2} \\
 &\vdots \\
 A_{2M,2M}\Psi_{2M} + A_{2M,3M}\Psi_{3M} + A_{2M,2M+1}\Psi_{M+1} \\
 + A_{2M,M}\Psi_M + A_{2M,2M-1}\Psi_{2M-1} &= a^2 D_{2M,2M}\Psi_{2M} \\
 &\vdots \\
 A_{N^*M,N^*M}\Psi_{N^*M} + A_{N^*M,N^*M-M}\Psi_{N^*M-M} + A_{N^*M,N^*M+1}\Psi_{N^*M-M+1} \\
 + A_{N^*M,N^*M-1}\Psi_{N^*M-1} &= a^2 D_{N^*M,N^*M}\Psi_{N^*M}
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

debido a las condiciones de frontera cuando $j = 1$ y $j = M$ los elementos asociados a Ψ_{s-1} y Ψ_{s+1} se renombran pero los valores de A seguirán siendo los valores i, j ya calculados. Los términos de A pueden ser rescritos en una matriz A de orden $(N \times M) \times (N \times M)$ con los elementos distribuidos de la manera siguiente



donde los óvalos representan los elementos distintos de cero en diagonales y los círculos blancos

dentro de los cuadros los elementos esparcidos distintos de cero fuera de estas diagonales. Observemos que esta matriz es esparcida, simétrica y pentadiagonal. La simetría se presenta además en las subdiagonales cada M elementos. Así obtenemos la ecuación matricial

$$\mathbb{A}\vec{\Psi} = a^2\mathbb{D}\vec{\Psi} \quad (4.18)$$

y como se ha hecho previamente planeamos reescribirla dejando $\vec{\Psi}$ libre en el lado derecho de tal manera que podamos resolverla numéricamente. Repitiendo el proceso realizado anteriormente al considerar $\vec{\Psi} = \mathbb{L}\vec{\psi}$ encontraremos que

$$\mathbb{L} = \frac{\delta_{s(i,j),s(i,j)}}{\sqrt{\rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})}}. \quad (4.19)$$

obteniéndose la ecuación matricial

$$\mathbb{L}^\dagger \mathbb{A} \mathbb{L} \vec{\psi} = a^2 \vec{\psi}. \quad (4.20)$$

Es importante notar que los valores de la matriz se distribuyen de la misma manera. Es decir, se preserva la distribución simétrica para la matriz transformada. Entonces nuestra matriz resultante de este producto es pentadiagonal, con algunos elementos que aparecen periódicamente fuera de las diagonales de manera que cualquier elemento fuera de estos valores será cero. Las condiciones de frontera de Neumann modifican los elementos de matriz resultando en la expresión discretizada de la ecuación

$$\begin{aligned} & \left\{ \left[\left(\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} \right) (1 - \delta_{1i}) + \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) \right] \frac{1}{\rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})} \right. \\ & + \left. \left[\left(\frac{1}{(\phi_j - \phi_{j-1})} \right) + \left(\frac{1}{(\phi_{j+1} - \phi_j)} \right) \right] \left(\frac{2}{\rho_i^2(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})} \right) \right\} \Psi_{i,j} \\ & - \frac{1}{\sqrt{\rho_i \rho_{i-1}(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})(\rho_i - \rho_{i-2})}} \left(\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} \right) \Psi_{i-1,j} \\ & - \frac{1}{\sqrt{\rho_{i+1} \rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})(\rho_{i+2} - \rho_i)}} \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) \Psi_{i+1,j} \\ & - \frac{2}{\rho_i^2(\phi_j - \phi_{j-1})\sqrt{(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})(\phi_j - \phi_{j-2})}} \Psi_{i,j-1} \\ & - \frac{2}{\rho_i^2(\phi_{j+1} - \phi_j)\sqrt{(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})(\phi_{j+2} - \phi_j)}} \Psi_{i,j+1} = a^2 \Psi_{i,j}. \end{aligned}$$

Las condiciones de frontera cíclicas se hacen notar sobre los índices de los elementos afectados, de modo que los elementos de matriz podemos escribirlos como

$$\begin{aligned}
 A_{s,s} &= \left\{ \left[\left(\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} \right) (1 - \delta_{1i}) + \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) \right] \frac{1}{\rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})} \right. \\
 &\quad \left. + \left[\left(\frac{1}{(\phi_j - \phi_{j-1})} \right) + \left(\frac{1}{(\phi_{j+1} - \phi_j)} \right) \right] \left(\frac{2}{\rho_i^2(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})} \right) \right\} \\
 A_{s(i,j),s(i,j)-M} &= -\frac{1}{\sqrt{\rho_{i+1}\rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})(\rho_{i+2} - \rho_i)}} \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) \\
 A_{s(i,j),s(i,j)+M} &= -\frac{1}{\sqrt{\rho_{i+1}\rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})(\rho_{i+2} - \rho_i)}} \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) \quad (4.21) \\
 A_{s(i,j),s(i,j)-1+(M+1)\delta(j,M)} &= -\frac{2}{\rho_i^2(\phi_j - \phi_{j-1})\sqrt{(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})(\phi_j - \phi_{j-2})}} \\
 A_{s(i,j),s(i,j)+1-(M-1)\delta(j,M)} &= -\frac{2}{\rho_i^2(\phi_{j+1} - \phi_j)\sqrt{(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})(\phi_{j+2} - \phi_j)}}.
 \end{aligned}$$

Estas serán las expresiones que implementaremos para nuestro cálculo numérico cuando se tiene condición tipo Neumann al origen. Cuando se tiene condición tipo Dirichlet al origen el procedimiento es el mismo. Aplicando la condición encontramos que los elementos $\Psi_{0,j} = 0$ y la relación matricial se modifica sólo en el término diagonal de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 A_{s,s} &= \left\{ \left[\left(\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} \right) + \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) \right] \frac{1}{\rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})} \right. \\
 &\quad \left. + \left[\left(\frac{1}{(\phi_j - \phi_{j-1})} \right) + \left(\frac{1}{(\phi_{j+1} - \phi_j)} \right) \right] \left(\frac{2}{\rho_i^2(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})} \right) \right\}. \quad (4.22)
 \end{aligned}$$

Hemos visto que el tratamiento numérico bidimensional requiere a pesar de todo una gran cantidad de elementos en la matriz por su propia naturaleza, por otro lado este toma bastante ventaja de la simetría de las matrices resultantes así como de la tridiagonalidad de estas. Estas limitantes han de tenerse en cuenta si se desea aplicar este tratamiento a problemas en donde los funcionales no sean hermitianos.

4.2. Comparación entre soluciones analíticas y numéricas

Como se vio en la sección 3.1 los valores k están relacionados con las raíces de la función de Bessel mediante la ecuación

$$k = \frac{j_{n,l}}{\rho_0} \quad (4.23)$$

donde $j_{n,l}$ corresponde con el valor del l -ésimo cero de la función de Bessel de orden n . De modo que si fijamos el valor $\rho_0 = 1$ los valores k serán los ceros de las funciones de Bessel y además deberán duplicarse aquellos de orden diferente a cero. En la figura 4.1 muestra el espectro para 30 eigenvalores. Los valores esperados se han obtenido con la paquetería disponible de Julia y los eigenvalores con *eigs* como se ha hecho previamente. Lo primero que notamos es la forma en que se aproxima el valor numérico al valor esperado cuando se aumenta la precisión en la malla, esto nos da los parámetros con los que es preferible realizar los cálculos. Este resultado es puramente ilustrativo de manera que no se busca una precisión mas allá de dos cifras después del punto decimal. Una de las cosas más evidentes, es que, los valores esperados y los obtenidos mediante el cálculo numérico difieren cada vez más mientras aumenta la magnitud del eigenvalor, lo cual puede notarse mejor en la gráfica donde la precisión es menor. Este comportamiento es de esperarse y es un efecto que se ha observado previamente debido a la mayor oscilación de las funciones de orden mayor. Finalmente en la tabla 4.1 se presentan algunos eigenvalores representativos y en esta se puede observar que aparece el fenómeno de duplicidad de los eigenvalores, comportamiento que se esperaba por la duplicidad del eigenvalor encontrada al resolver la ecuación angular, dicho de otro modo, este fenómeno se presenta debido a la simetría angular presente.

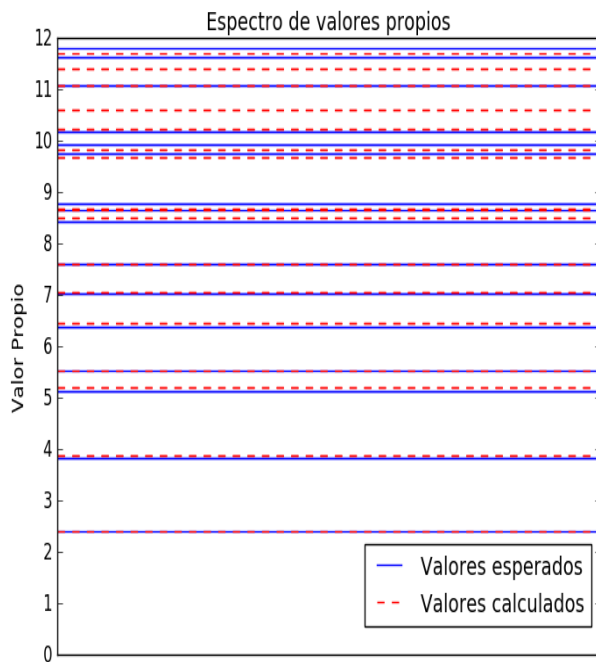
Eigenvalores				
Orden n,m del cero de la fun- ción de Bessel	200 puntos ra- diales y 30 angu- lares	200 puntos ra- diales y 700 an- gulares	200 puntos ra- diales y 1200 an- gulares	Valores espera- dos
01	2.40483	2.40483	2.40483	2.40483
11	3.87529	3.83350	3.83270	3.83171
11	3.87529	3.83350	3.83270	3.83171
21	5.20250	5.13916	5.13767	5.13562
21	5.20250	5.13916	5.13767	5.13562
02	5.52004	5.52004	5.52004	5.52008
31	6.44015	6.38522	6.38311	6.38016
31	6.44015	6.38522	6.38311	6.38016

Tabla 4.1: Algunos de los eigenvalores calculados numéricamente. Aquí se aprecia la duplicidad de aquellos diferentes de cero. Los valores esperados fueron extraídos de [30]

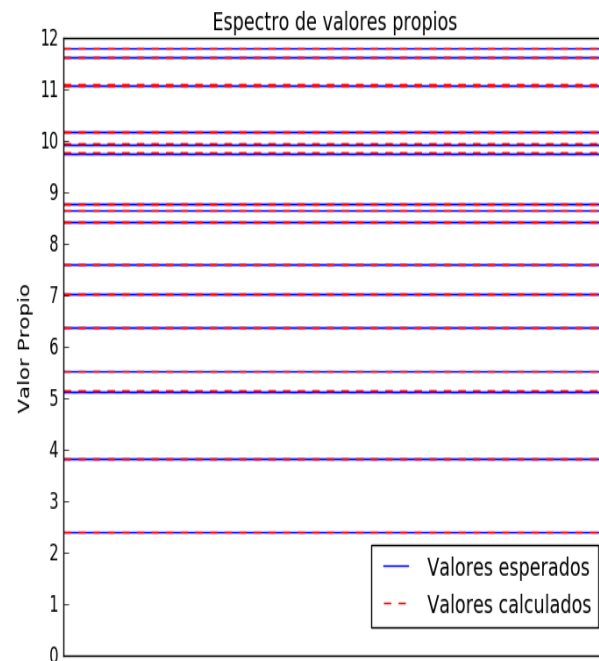
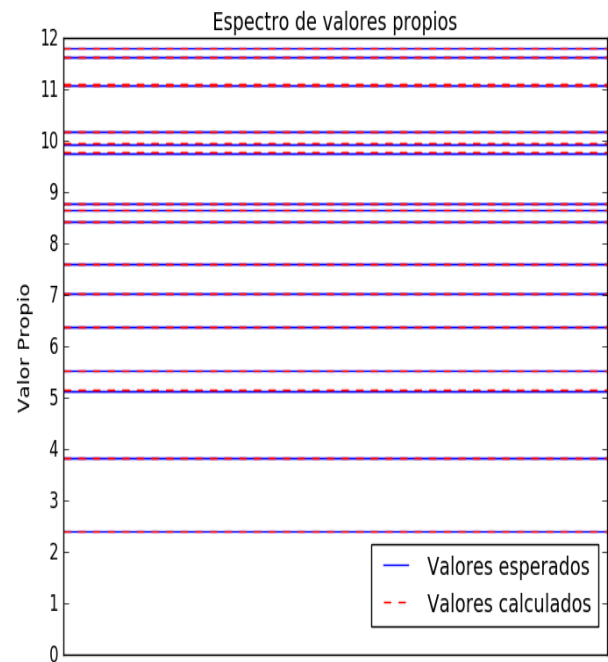
Se ha resuelto numéricamente el problema de Helmholtz en dos dimensiones y como hemos visto, el tratamiento bidimensional nos permite obtener una solución completa del problema y así, un modelo cuyos resultados se adecuan al resultado esperado, dependiendo solamente del tipo malla utilizada en cada caso. De manera que, si se buscan resultados más precisos, solamente se ha de modificar el tipo de malla utilizada, refinándose o utilizando una división diferente que dependerá de las características del sistema que se desee estudiar. Este resultado nos permite extender nuestro estudio para problemas similares a la ecuación de Helmholtz. En particular el estudio de sistemas físicos puede complicarse rápidamente debido a que una descripción realista de un sistema físico e incluso modelos sencillos de estos pueden conllevar

a que, encontrar soluciones exactas sea un gran reto. Los sistemas cuánticos se complican rápidamente debido a que incluso sistemas sencillos requieren la solución de una ecuación de segundo grado y en estos la intuición ayuda poco a visualizar una solución. Por estas razones buscaremos las soluciones numéricas a la ecuación de Schrödinger en una o dos dimensiones, ya que, si elegimos adecuadamente la forma de discretizar nuestros funcionales de tal manera no se modifique drásticamente la forma de la ecuación matricial ni la matriz de coeficientes debido al potencial aplicado, en cada caso el problema resultante no será muy diferente al de Helmholtz.

(a) 30 puntos radiales y 200 puntos angulares



(b) 200 puntos radiales y 700 puntos angulares



(c) 200 puntos radiales y 1200 puntos angulares

Figura 4.1: Comparación del espectro de eigenvalores para distintas configuraciones de la malla.

Aplicaciones del tratamiento numérico en una dimensión

Los métodos desarrollados pueden ser utilizados para resolver problemas en donde las ventajas de estos puedan ser aprovechadas, en particular mostraremos que es posible aplicar nuestra herramienta a ejemplos de física cuántica, relacionados con la ecuación de Schrödinger. Limitaremos el estudio a sistemas en una dimensión, esto simplifica el problema numérico de manera que la discretización sea sencilla y así podremos analizar las soluciones de estos sistemas, buscando poder verificar los resultados esperados así como identificar el comportamiento de sistemas similares, de modo que, estudiaremos principalmente el oscilador armónico así como las variaciones de este para poder establecer comparaciones y describir el comportamiento de estos sistemas.

5.1. Oscilador armónico

El oscilador armónico cuántico es uno de los casos más sencillos en los que nos es posible trabajar con la ecuación de Schrödinger. Su utilidad no sólo se encuentra en ser un buen candidato para mostrar la utilidad de nuestra herramienta numérica, sino que al poseer una solución exacta nos permite establecer comparaciones con otros problemas aparentemente más complejos que podrían no poseer una solución analítica. El oscilador armónico clásico para una partícula tiene como característica principal una función hamiltoniana como la siguiente

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + \frac{\mu\omega^2 r^2}{2} \quad (5.1)$$

Donde μ es la masa de la partícula, \vec{p} el momento y ω la frecuencia angular de la trampa. En mecánica cuántica el operador hamiltoniano a través del potencial determina las condiciones

CAPÍTULO 5. APLICACIONES DEL TRATAMIENTO NUMÉRICO EN UNA DIMENSIÓN

bajo las que nuestra partícula interactuará con el entorno

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{P}}{2\mu} + \mathbf{V} \quad (5.2)$$

de modo que en mecánica cuántica ha de entenderse como un oscilador armónico a un sistema descrito por el operador hamiltoniano [22, 28]

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{P}}{2\mu} + \frac{\mu\omega^2\mathbf{X}^2}{2} \quad (5.3)$$

donde \mathbf{P} es el operador de momento y \mathbf{X} es el operador de coordenadas. En general, para una función de estado descrita por un hamiltoniano \mathbf{H} la ecuación de Schrödinger es

$$\mathbf{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

en ausencia de campos externos variables, el hamiltoniano será independiente del tiempo de modo que podemos separar variables $\Psi = \psi(r)T(t)$ y tener entonces

$$\begin{aligned} \mathbf{H}\psi &= E\psi \\ i\hbar\frac{\partial T}{\partial t} &= ET(t) \end{aligned}$$

la parte dependiente del tiempo tiene como solución

$$T(t) = Ce^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

la ecuación restante será sólo dependiente de las coordenadas y así es como obtenemos la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Para un potencial en general tenemos la ecuación

$$\left(\frac{\mathbf{P}}{2\mu} + \mathbf{V}\right)\psi = E\psi.$$

En una dimensión y para un potencial en general la ecuación se reduce a

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu}\psi''(x) + V(x)\psi = E\psi. \quad (5.4)$$

En el caso del potencial de oscilador armónico la ecuación correspondiente es:

$$\begin{aligned} \frac{-\hbar^2}{2\mu}\psi''(x) + \frac{\mu\omega^2 x^2}{2}\psi &= E\psi \quad \text{ó} \\ \frac{\hbar}{w\mu}\psi''(x) + \left(\frac{2E}{w\hbar} - \frac{\mu\omega x^2}{\hbar}\right)\psi &= 0. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Para hallar una solución hagamos el cambio de variables $s = \frac{2E}{w\hbar}$, $\alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$ y $u = \alpha x$ [28] entonces, tendremos la ecuación

$$\psi''(u) + (s - u^2)\psi(u) = 0. \quad (5.6)$$

Cuando $u \rightarrow \infty$ en (5.6), s es despreciable de modo que

$$\psi''(x) - u^2\psi \approx 0,$$

esto implica que

$$\psi(u) \approx e^{\pm \frac{u^2}{2}}.$$

Se elige la parte negativa del exponente ya que si $u \rightarrow \infty$ entonces $\psi(u) \rightarrow 0$. De esta manera consideremos la solución de la siguiente forma

$$\psi(u) = e^{-\frac{u^2}{2}} H(u) \tag{5.7}$$

donde $H(u)$ es una función que debe complementar la solución propuesta en el caso asintótico. En particular un polinomio podría ajustarse de manera adecuada a nuestra solución. Ahora, para conocer la solución sustituimos la propuesta de solución. Entonces tenemos que:

$$\begin{aligned} \psi'(u) &= -ue^{-\frac{u^2}{2}} H(u) + e^{-\frac{u^2}{2}} H'(u) \\ \psi''(u) &= -e^{-\frac{u^2}{2}} H(u) + u^2 e^{-\frac{u^2}{2}} H(u) - 2ue^{-\frac{u^2}{2}} H'(u) + e^{-\frac{u^2}{2}} H''(u) \end{aligned}$$

y al introducir esto en (5.6) obtenemos

$$e^{-\frac{u^2}{2}} (-H(u) + u^2 H(u) - 2uH'(u) + H''(u) + (s - u^2)H(u)) = 0$$

que podemos reducir a

$$H''(u) - 2uH'(u) + (s - 1)H(u) = 0 \tag{5.8}$$

Ahora, para resolver esta ecuación proponemos el polinomio $H(u) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k u^k$. Al introducir en (5.8) tenemos

$$\sum_{k=2}^{\infty} (a_k k(k-1)u^{k-2} - \sum_{k=0}^{\infty} 2a_k k u^k + (s-1)a_k u^k) = 0$$

renombremos el índice en el primer termino $k \rightarrow k+2$ para que dicha suma comience en cero. Con ello obtenemos

$$\sum_{k=0}^{\infty} (a_{k+2}(k+2)(k+1) + (-2k+s-1)a_k)u^k = 0.$$

Para satisfacer la condición de que la suma es cero para todo x , es necesario que se cumpla la siguiente relación de recurrencia

$$a_{k+2} = a_k \frac{2k+1-s}{(k+2)(k+1)}. \tag{5.9}$$

Si en (5.9) detenemos el polinomio para $k = n$, entonces la relación de recurrencia es finita, de modo que ha de cumplirse

$$s = 2n + 1$$

CAPÍTULO 5. APLICACIONES DEL TRATAMIENTO NUMÉRICO EN UNA DIMENSIÓN

y tomando en cuenta que $s = \frac{2E}{w\hbar}$, entonces

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) w\hbar \quad (5.10)$$

y con ello también obtenemos los valores propios de nuestra ecuación y por lo tanto las energías permitidas en nuestro sistema.

Por otro lado deseamos hallar la discretización de (5.4). Para ello, procedemos como hemos hecho previamente multiplicando por la función conjugada e integrando, considerando unidades atómicas

$$\int_0^L \left(-\frac{1}{2}\psi^*\psi'' + V(x)\psi^*\psi\right) dx = E \int_0^L \psi^*\psi dx$$

Hemos usado en el rango de integración sólo la mitad del intervalo ya que, como el potencial posee simetría en el eje vertical y usaremos la simetría del problema para reducir los recursos necesarios para obtener una mejor precisión en las soluciones numéricas, por otro lado, ya que buscamos la partícula en todo el espacio debemos integrar de cero a infinito, donde infinito es L . Usamos L debido a que numéricamente es imposible tener un espacio infinito, así que, tendremos un espacio finito de longitud L pero lo suficientemente grande para obtener los resultados esperados. Una vez dicho esto integramos por partes y obtenemos

$$-\frac{1}{2} \int_0^L d(\psi^*\psi') dx + \frac{1}{2} \int_0^L \psi'^*\psi' dx + \int_0^L V(x)\psi^*\psi dx = E \int_0^L \psi^*\psi dx$$

pero

$$\int_0^L d(\psi^*\psi') dx = \psi^*(L)\psi'(L) - \psi^*(0)\psi'(0)$$

por las condiciones de frontera estos términos son cero. Podemos observar fácilmente que el operador es hermitiano:

$$\int_0^L (\psi'^*\psi' + 2V(x)\psi^*\psi) dx = 2E \int_0^L \psi^*\psi dx. \quad (5.11)$$

Recurrimos a la discretización del funcional en la integral (5.11) y obtenemos

$$\begin{aligned} & \left[\left(\frac{\psi_{i+\frac{1}{2}}^* - \psi_{i+\frac{1}{2}}}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} \right) \left(\frac{\psi_{i+\frac{1}{2}} - \psi_{i+\frac{1}{2}}}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} \right) + 2V_i\psi_i^*\psi_i \right] (x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}) \\ & = 2E\psi_i^*\psi_i (x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}) \end{aligned}$$

entonces

$$\begin{aligned} & \frac{\psi_{i+\frac{1}{2}}^*\psi_{i+\frac{1}{2}}}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} - \frac{\psi_{i+\frac{1}{2}}^*\psi_{i-\frac{1}{2}}}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} - \frac{\psi_{i-\frac{1}{2}}^*\psi_{i+\frac{1}{2}}}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} + \frac{\psi_{i-\frac{1}{2}}^*\psi_{i-\frac{1}{2}}}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} \\ & + 2V_i\psi_i^*\psi_i (x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}) = 2E\psi_i^*\psi_i (x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}) \end{aligned}$$

CAPÍTULO 5. APLICACIONES DEL TRATAMIENTO NUMÉRICO EN UNA
DIMENSIÓN

Buscamos extremar este funcional, así que derivamos respecto a ψ_i^* recorriendo el índice donde sea necesario, además recordemos que $x_{i\pm\frac{1}{2}} = \frac{x_i+x_{i\pm 1}}{2}$, de esta manera encontramos

$$\left(\frac{1}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} + V_i(x_{i+1} - x_{i-1}) \right) \psi_i - \frac{\psi_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} - \frac{\psi_{i+1}}{x_{i+1} - x_i} = E\psi_i(x_{i+1} - x_{i-1})$$

que podemos expresar como

$$A_{i,i}\psi_i + A_{i,i-1}\psi_{i-1} + A_{i,i+1}\psi_{i+1} = E\psi_i D_{s,s} \quad (5.12)$$

donde

$$\begin{aligned} A_{i,i} &= \frac{1}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} + V_i(x_{i+1} - x_{i-1}) \\ A_{i,i-1} &= -\frac{1}{x_i - x_{i-1}} \\ A_{i,i+1} &= -\frac{1}{x_{i+1} - x_i} \\ D_{s,s} &= x_{i+1} - x_{i-1} \end{aligned}$$

la matriz de entradas \mathbb{D} es una matriz diagonal y la de entradas \mathbb{A} una tridiagonal. Así, la ecuación matricial es

$$\mathbb{A}\vec{\psi} = E\mathbb{D}\vec{\psi}.$$

Buscamos dejar libre el vector $\vec{\psi}$ de tal modo que la matriz resultante siga siendo una matriz simétrica y el lado derecho nos permita encontrar los valores de este en términos de los valores de \mathbb{A} . Entonces para este cometido consideremos, como lo hemos hecho previamente $\vec{\psi} = \mathbb{L}\vec{\phi}$, entonces

$$\mathbb{A}\mathbb{L}\vec{\phi} = E\mathbb{D}\mathbb{L}\vec{\phi}.$$

Repitiendo el mismo procedimiento realizado en capítulos anteriores podemos encontrar que

$$\mathbb{L} = \frac{\delta_{i,i}}{\sqrt{x_{i+1} - x_{i-1}}}$$

de este modo quedamos con la ecuación matricial

$$\mathbb{A}'\vec{\phi} = \mathbb{L}\mathbb{A}\mathbb{L}\vec{\phi} = E\vec{\phi}$$

continuaremos llamando \mathbb{A} a \mathbb{A}' . Ahora, si desarrollamos la ecuación anterior encontraremos que la nueva relación de recurrencia es

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{1}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \right) \left(\frac{1}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) + V_i \right] \psi_i - \frac{\psi_{i-1}}{(x_i - x_{i-1})\sqrt{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_i - x_{i-2})}} \\ - \frac{\psi_{i+1}}{(x_{i+1} - x_i)\sqrt{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+2} - x_i)}} = E\psi_i \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned}
 A_{i,i} &= \left(\frac{1}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \right) \left(\frac{1}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) + V_i \\
 A_{i,i-1} &= -\frac{1}{(x_i - x_{i-1})\sqrt{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_i - x_{i-2})}} \\
 A_{i,i+1} &= -\frac{1}{(x_{i+1} - x_i)\sqrt{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+2} - x_i)}}
 \end{aligned}$$

Para obtener estas relaciones de recurrencia se han utilizado unidades atómicas por conveniencia y en adelante en cada discretización se usaran estas unidades. Ahora como mencionamos previamente, el potencial presenta simetría en el eje vertical y podemos aprovechar este hecho para reducir el trabajo computacional. Si consideramos sólo el rango positivo de nuestro problema debido a la simetría por el eje vertical, tendremos el problema entre cero e infinito. Si aplicamos condiciones tipo Neumann en el origen obtendremos las soluciones pares del problema, por otro lado con las condiciones tipo Dirichlet en el origen obtendremos soluciones impares del problema, esto se debe a que las eigenfunciones son a su vez funciones pares e impares alrededor del origen, esto es, por un lado obtenemos las soluciones pares por una condición que aprovecha la simetría de las soluciones y por el otro las soluciones impares por una condición que aprovecha la antisimetría de la solución. Es importante tener en cuenta que esto solo funciona debido a la simetría del potencial en uno de los ejes. Habiendo mencionado lo anterior las condiciones de frontera se manifiestan en nuestra malla como

$$\begin{aligned}
 \psi(0) &= 0 \rightarrow \psi_0 = \psi_1 \\
 \psi(L) &= 0 \rightarrow \psi_N = 0
 \end{aligned}$$

para las funciones impares y para las funciones pares tenemos

$$\begin{aligned}
 \psi'(0) &= 0 \rightarrow \psi_0 = \psi_1 \\
 \psi(L) &= 0 \rightarrow \psi_N = 0
 \end{aligned}$$

con L la frontera que consideramos a infinito. Entonces en ambos casos tenemos una malla de $N + 2$ elementos, sin embargo, el primer y último elemento del vector son cero. De esta manera la relación matricial es:

$$\begin{aligned}
 A_{i,i} &= \left(\frac{\delta_{1,i}}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \right) \left(\frac{1}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) + \frac{x_i^2}{2} \\
 A_{i,i-1} &= -\frac{1}{(x_i - x_{i-1})\sqrt{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_i - x_{i-2})}} \\
 A_{i,i+1} &= -\frac{1}{(x_{i+1} - x_i)\sqrt{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+2} - x_i)}}
 \end{aligned} \tag{5.13}$$

para las funciones pares y para las funciones impares solo cambia el término diagonal

$$A_{i,i} = \left(\frac{\delta_{1,i}}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \right) \left(\frac{1}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) + \frac{x_i^2}{2}. \tag{5.14}$$

Para una malla con $L = 20$ dividida en 1000 puntos se ha conseguido una precisión que nos permite obtener eigenvalores cercanos al valor esperado, esto puede apreciarse en la Figura 5.1 donde se muestra el espectro obtenido para 20 eigenvalores calculados. Como podemos observar los valores esperados y numéricos se encuentran lo suficientemente cercanos para sobreponerse en la gráfica en la escala presentada sin que se note alguna diferencia. Físicamente tenemos un estado base e infinitos estados de energía permitidos.

El potencial armónico estudiado en esta sección es un potencial infinito, sin embargo, los potenciales existentes en la naturaleza son todos finitos, de manera que, estudiar variaciones de este tipo de potenciales parece conveniente. Por lo tanto en las siguientes secciones estudiaremos algunos ejemplos de potenciales finitos y principalmente variaciones del oscilador armónico de tal manera que podamos comparar los resultados obtenidos con otros ya conocidos previamente.

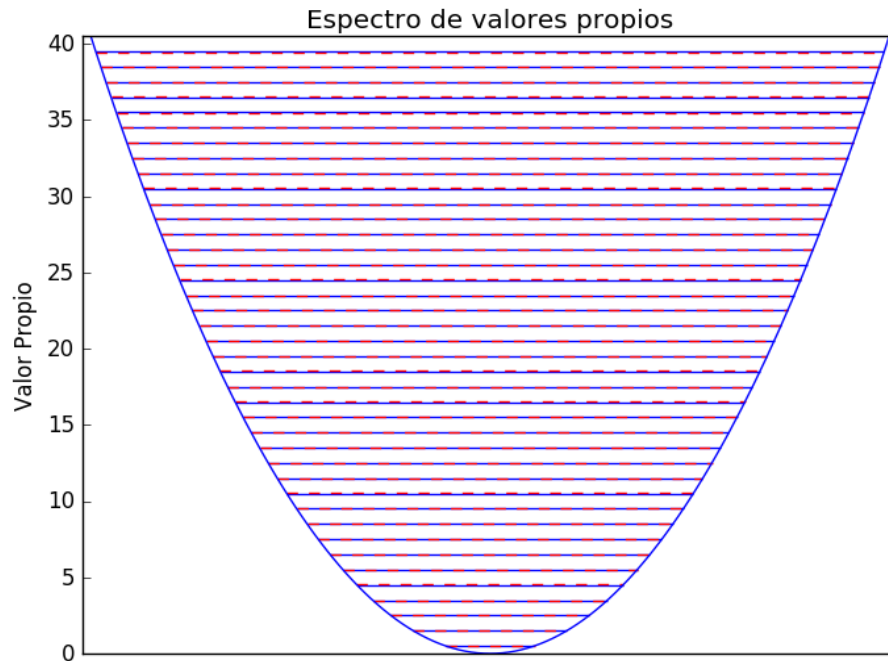


Figura 5.1: Espectro de eigenvalores con malla de 0 a 20 unidades, con 1000 divisiones en la malla y 20 valores propios calculados. Los valores esperados se presentan en azul y los calculados numéricamente en rojo y la forma del potencial se encuentra en el borde azul.

5.2. Oscilador armónico truncado

Entenderemos por este potencial aquel que se comporta igual que el oscilador armónico hasta cierto un valor V_0 y luego permanece constante, esto lo expresaremos de la siguiente manera:

$$V(x) = \begin{cases} \frac{\mu\omega^2 x^2}{2} & \text{si } |x| < V_0 \\ \frac{\mu\omega^2 V_0^2}{2} & \text{si } V_0 \leq |x| \end{cases} \quad (5.15)$$

Entonces tendremos dos casos para la ecuación de Schrödinger, si $|x| \leq V_0$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi_1''(x) + \frac{\mu\omega^2 x^2}{2}\psi_1 = E\psi_1 \quad (5.16)$$

y si $V_0 \leq |x|$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi_2''(x) + \frac{\mu\omega^2 V_0^2}{2}\psi_2 = E\psi_2 \quad (5.17)$$

debido a la complejidad para encontrar una solución analítica a este problema la solución numérica es una buena manera de resolverlo. Nuevamente utilizaremos la simetría del potencial para reducir los recursos necesarios para mejorar la precisión de las soluciones, una vez más, en el origen las condiciones de Neumann se aplicarán para encontrar las soluciones pares y las condiciones de Dirichlet para las impares. La discretización de (5.16) y (5.17) resulta en que los elementos de la matriz resultantes de la relación de recurrencia en el caso de Neumann son para $|x_i| < V_0$

$$\begin{aligned} A_{i,i} &= \left(\frac{\delta_{1,i}}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \right) \left(\frac{1}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) + \frac{x_i^2}{2} \\ A_{i,i-1} &= -\frac{1}{(x_i - x_{i-1})\sqrt{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_i - x_{i-2})}} \\ A_{i,i+1} &= -\frac{1}{(x_{i+1} - x_i)\sqrt{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+2} - x_i)}} \end{aligned} \quad (5.18)$$

y otro para $V_0 < |x_i|$. Ya que el único elemento modificado es el de potencial, la única ecuación que cambia es la diagonal de la matriz \mathbb{A}

$$A_{i,i} = \left(\frac{\delta_{1,i}}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \right) \left(\frac{1}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) + \frac{V_0^2}{2}. \quad (5.19)$$

Para las condiciones de Dirichlet sólo cambian los términos diagonales, así que nuevamente para $|x_i| < V_0$

$$A_{i,i} = \left(\frac{1}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \right) \left(\frac{1}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) + \frac{x_i^2}{2} \quad (5.20)$$

Ya que el único elemento modificado es el de potencial, para $V_0 \leq |x_i|$ la única ecuación que cambia es

$$A_{i,i} = \left(\frac{1}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \right) \left(\frac{1}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) + \frac{V_0^2}{2}. \quad (5.21)$$

La Figura 5.4 al final de la siguiente sección nos muestra el espectro de valores propios obtenido para el oscilador armónico, el armónico truncado y el potencial cuadrado presentados en la misma gráfica para poder compararlos. Todos estos son valores obtenidos numéricamente. En la Figura 5.4 comparamos con el resultado de nuestro oscilador armónico y encontramos que en los tres casos, los valores propios de orden bajo del oscilador armónico truncado son bastante similares a los del oscilador armónico infinito, la diferencia incrementa mientras nos acercamos al valor límite establecido en la barrera de potencial, con los valores de este desplazándose hacia abajo con respecto a los del oscilador armónico. Esto se debe a que en el caso del oscilador armónico tenemos un potencial infinito, lo que ocasiona que la partícula pueda encontrarse sólo en esta región del espacio de manera que toda la energía esta confinada. Por otro lado en este caso, al ser finito el potencial su capacidad de confinamiento se ve limitada, de manera que, a pesar de tener una energía por debajo de la barrera de potencial es posible encontrar a la partícula fuera de la región de confinamiento, entonces, parte de la energía es utilizada para que la partícula se encuentre fuera de esta región y por esto los mismos órdenes de niveles de energía poseen magnitudes menores comparados con los del oscilador armónico, de modo que la capacidad de confinamiento depende de cada sistema estudiado. De esta manera es posible aproximar el comportamiento del oscilador armónico truncado con los primeros estados del oscilador armónico y ya que los potenciales reales son finitos, un modelamiento físico de estos es más cercano al oscilador armónico truncado que al oscilador armónico infinito, así que, si se desea medir los valores de energía de un sistema similar al oscilador armónico nunca obtendremos exactamente las mismas magnitudes y además de esto, todos ellos tendrán como límite superior los eigenvalores encontrados en 5.10. La gráfica de los potenciales utilizados en cada caso se muestra en 5.2.

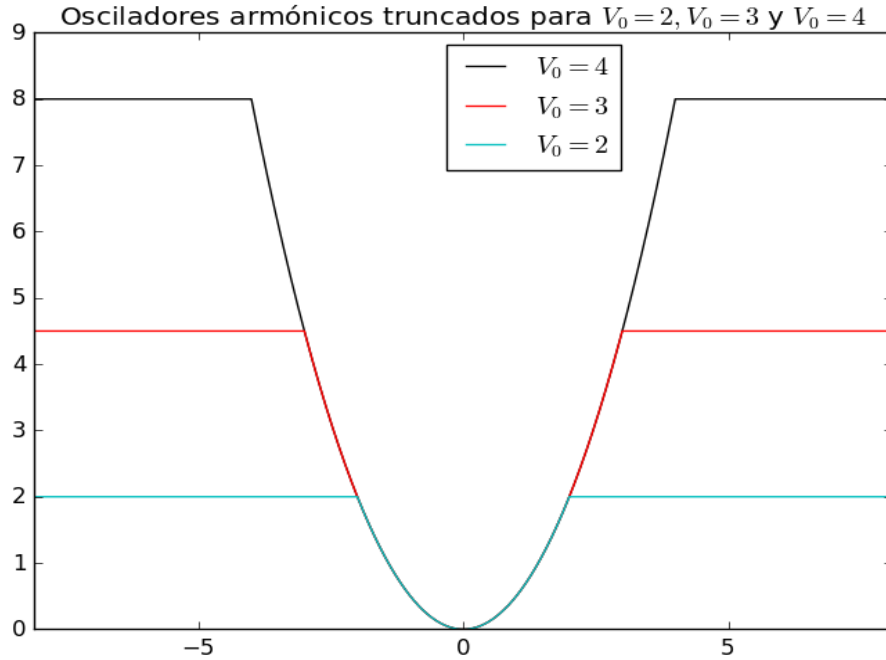


Figura 5.2: Forma del potencial utilizado en cada caso.

5.3. Potencial escalón

El escalón cuadrado de potencial o pozo cuántico finito es otro ejemplo común de estudio en los cursos de mecánica cuántica. En una dimensión este potencial tiene el comportamiento siguiente [22] :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in [-L_0, L_0] \\ \frac{\mu\omega^2 V_0^2}{2} & \text{si } |x| > L_0. \end{cases} \quad (5.22)$$

Para poder comparar los resultados de este potencial con el oscilador armónico truncado debemos cuidar que las áreas en las que el potencial condiciona el movimiento de la partícula sean iguales en cada caso. Para esto calculamos el valor del potencial considerando que el área en una parábola entre $-V_0$ y V_0 es $\frac{2V_0^3}{3}$ y el área de un rectángulo de altura $\frac{V_0^2}{2}$ entre $-L_0$ y L_0 es $V_0^2 L_0$ entonces para que las áreas del oscilador armónico y el escalón cuadrado sean iguales es necesario se cumpla que

$$V_0^2 L_0 = \frac{2V_0^3}{3}, \quad (5.23)$$

y así

$$L_0 = \frac{2V_0}{3}. \quad (5.24)$$

CAPÍTULO 5. APLICACIONES DEL TRATAMIENTO NUMÉRICO EN UNA
DIMENSIÓN

Tendremos nuevamente dos ecuaciones y consideraremos unidades atómicas, así cuando la partícula se encuentre en la región $|x| > L_0$

$$\begin{aligned} \frac{-\hbar^2}{2\mu}\psi''(x) + V_0\psi &= E\psi \quad \text{ó} \\ \psi_1''(x) &= a^2\psi_1 \\ \psi_3''(x) &= a^2\psi_3 \end{aligned}$$

y cuando se encuentra en la región $x \in [-L_0, L_0]$

$$\begin{aligned} \frac{-\hbar^2}{2\mu}\psi''(x) &= E\psi \quad \text{ó} \\ \psi_2''(x) &= -b^2\psi_2 \end{aligned}$$

con $a = \sqrt{\frac{(V_0-E)2\mu}{\hbar^2}}$ y $b = \sqrt{\frac{E2\mu}{\hbar^2}}$. Como podemos observar los valores de a y b dependerán ampliamente del valor de E . Cuando $V_0 > E$ los valores de a y b son reales de modo que las soluciones toman la forma

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) &= Ae^{ax} + Be^{-ax} \\ \psi_2(x) &= F \cos(bx) + G \sin(bx) \\ \psi_3(x) &= Ce^{ax} + De^{-ax} \end{cases}$$

Para ψ_1 si $x \rightarrow -\infty$ entonces esta va a infinito y esta no es una condición aceptable para nuestra ecuación ya que no posee una interpretación física de modo que $B = 0$ lo mismo sucede para ψ_3 si $x \rightarrow \infty$ por lo tanto $C = 0$. Por otro lado en una dimensión las funciones que satisfacen la ecuación de Schrödinger con potenciales pares tienen paridad definida, de modo que, si consideramos funciones par como solución

$$\begin{aligned} \psi_2'(0) &= G = 0 \\ Ae^{-aL_0} &= De^{-aL_0} \text{ entonces } A = D \end{aligned}$$

así nuestras soluciones son

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) &= Ae^{ax} \\ \psi_2(x) &= F \cos(bx) \\ \psi_3(x) &= Ae^{-ax} \end{cases}$$

La solución debe ser continua en todo el dominio, de manera que ha de cumplirse

$$\begin{aligned} Ae^{-aL_0} &= F \cos(bL_0) \\ bF \sin(bL_0) &= aAe^{-aL_0} \end{aligned}$$

de donde se deduce la condición

$$b \tan(bL_0) = a$$

CAPÍTULO 5. APLICACIONES DEL TRATAMIENTO NUMÉRICO EN UNA DIMENSIÓN

Por otro lado si consideramos funciones impares

$$\begin{aligned}\psi_2'(0) &= F = 0 \\ Ae^{-aL_0} &= -De^{-aL_0} \text{ entonces } D = -A\end{aligned}$$

y nuestras soluciones son

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) &= Ae^{ax} \\ \psi_2(x) &= G \sin(bx) \\ \psi_3(x) &= -Ae^{-ax} \end{cases} \quad (5.25)$$

con condiciones de continuidad

$$\begin{aligned}Ae^{-aL_0} &= -G \sin(bL_0) \\ bG \cos(bL_0) &= aAe^{-aL_0}\end{aligned}$$

que implican la condición

$$a \tan(bL_0) = -b \quad (5.26)$$

ambas condiciones deducidas de la paridad de nuestra función pueden resolverse gráficamente o numéricamente. Para la condición de la función par, sea $y = bL_0$ y $z = \sqrt{\frac{V_0^2 \mu}{\hbar^2}} L_0$ entonces

$$\begin{aligned}aL_0 &= \sqrt{z^2 - y^2} \\ aL_0 &= L_0 b \tan(bL_0) = y \tan(y)\end{aligned}$$

de modo que

$$\begin{aligned}y \tan(y) &= \sqrt{z^2 - y^2} \\ \tan(y) &= \sqrt{\frac{z^2}{y^2} - 1}\end{aligned} \quad (5.27)$$

análogamente para las funciones impares

$$\cot(y) = \sqrt{\frac{z^2}{y^2} - 1} \quad (5.28)$$

Así las soluciones se presentarán en los puntos donde se cumpla la igualdad. Ya que estos valores están directamente relacionados con las energías del sistema estas nos proporcionarán el conjunto de valores de energía válidos en el sistema. Estos valores cortan la gráfica a lo más en n puntos de modo que para cada configuración tendremos a lo más n energías válidas. Ahora, debemos discretizar la ecuación considerando las condiciones en cada región del espacio y aprovechando nuevamente la simetría aplicamos las condiciones Neumann en el origen para las soluciones pares y tipo Dirichlet para hallar las soluciones impares. De modo que nos encontraremos con dos tipos de relaciones de recurrencia para ambas regiones del potencial. Ahora

al aplicar condiciones tipo Neumann y tomar en cuenta la región del espacio donde $V(x) = 0$ obtenemos

$$\begin{aligned} A_{i,i} &= \left(\frac{\delta_{1,i}}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \right) \left(\frac{1}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) \\ A_{i,i-1} &= -\frac{1}{(x_i - x_{i-1})\sqrt{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_i - x_{i-2})}} \\ A_{i,i+1} &= -\frac{1}{(x_{i+1} - x_i)\sqrt{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+2} - x_i)}} \end{aligned} \quad (5.29)$$

para la región del espacio donde $V(x) = V_0$ sólo se modifica el término diagonal de la matriz \mathbb{A}

$$A_{i,i} = \left(\frac{\delta_{1,i}}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \right) \left(\frac{1}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) + V_0 \quad (5.30)$$

posteriormente aplicamos condiciones tipo Dirichlet y observamos que sólo se modifican los elementos diagonales de la matriz, así que, en la región donde $V(x) = 0$ el único elemento diferente es

$$A_{i,i} = \left(\frac{1}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \right) \left(\frac{1}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) \quad (5.31)$$

y para la región del espacio donde $V(x) = V_0$ el único elemento diferente es

$$A_{i,i} = \left(\frac{1}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \right) \left(\frac{1}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) + V_0 \quad (5.32)$$

En la Figura 5.4 podemos observar que al igual que en el caso anterior los eigenvalores se encuentran desplazados hacia abajo respecto a los del oscilador armónico e incluso también respecto a los del oscilador armónico truncado debido a que también en este caso el potencial es finito. Notemos también que mientras aumenta el valor del potencial, el área que tiene una partícula para moverse dentro del potencial incrementa, ya que, al crecer V_0 lo hace también L_0 y de este modo el espacio en el que pueden encontrarse las partículas aumenta. Ahora, a pesar que el área de confinamiento es la misma en el caso del oscilador armónico truncado y en el pozo finito, los eigenvalores en el último se hallan desplazados hacia abajo con respecto a los otros dos. Esto nos dice que este potencial tiene aun menor capacidad de confinamiento que el oscilador armónico truncado y que el oscilador armónico infinito y ya que lo único que se ha modificado respecto al oscilador armónico truncado es la longitud L_0 en la que se restringe el movimiento de las partículas entonces podemos mencionar que existe una relación entre la capacidad de confinamiento que posee un potencial y la longitud L_0 en la que pueden encontrarse las partículas debajo de un valor específico de truncamiento. El gráfico del potencial utilizado se muestra en 5.3.

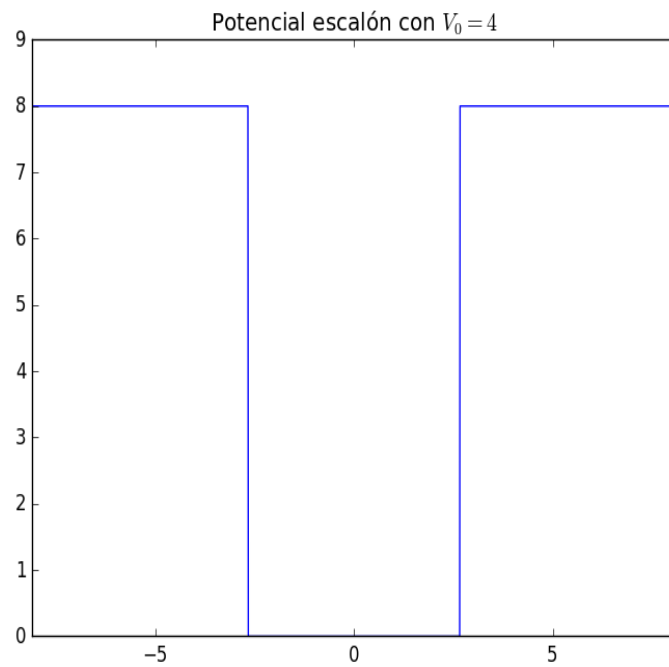


Figura 5.3: Forma del potencial utilizado en este caso.

CAPÍTULO 5. APLICACIONES DEL TRATAMIENTO NUMÉRICO EN UNA DIMENSIÓN

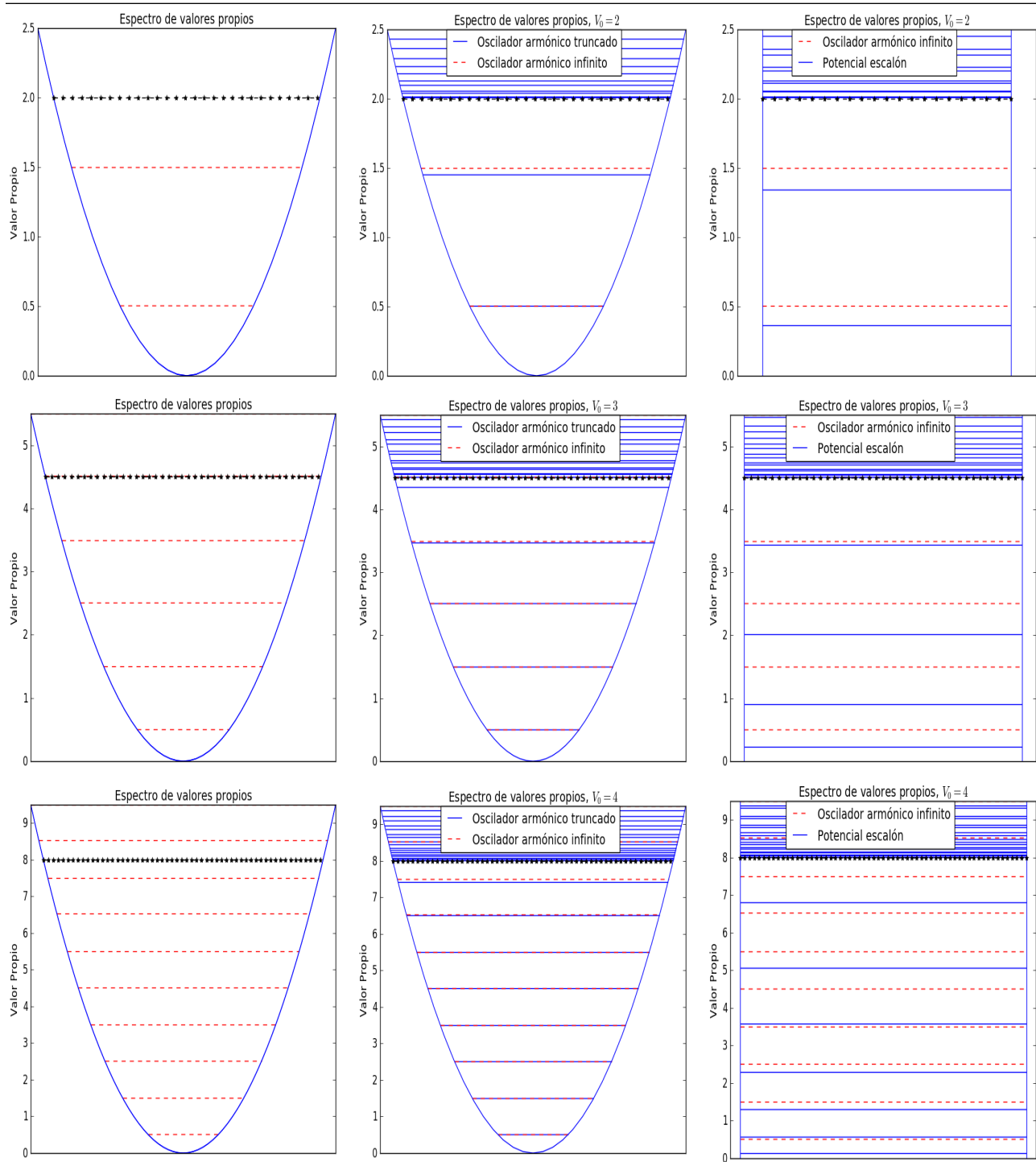


Figura 5.4: Comparación del espectro de eigenvalores para $V_0 = 2$, $V_0 = 3$ y $V_0 = 4$ para 1000 puntos en la malla, con V_0 el valor usado para el cálculo del potencial de truncamiento representado con marcas negras. Se muestra también el oscilador armónico infinito para poder comparar los eigenvalores en las mismas áreas de energía cinética. Las líneas punteadas en rojo son valores numéricos del oscilador armónico infinito y las líneas azules representan los eigenvalores numéricos calculados para el oscilador armónico truncado y el potencial escalón. Las marcas negras representan donde se encuentra el valor de la barrera de potencial.

5.4. Oscilador armónico-uniforme

Esta es una variación del oscilador armónico truncado que nos permite mostrar las capacidades de las diferencias finitas resolviendo un problema cuya propia naturaleza complica el obtener una solución analítica. En este caso el potencial por un lado del eje se comporta de la misma manera que el oscilador armónico truncado y por el otro crece en línea recta hasta el valor de truncamiento, esto puede ser expresado de la siguiente manera

$$V(x) = \begin{cases} \frac{\mu\omega^2 V_0^2}{2} & \text{si } |x| > V_0 \\ \frac{\mu\omega^2 x^2}{2} & \text{si } -V_0 \leq x \leq 0 \\ \frac{\mu\omega^2 V_0 x}{2} & \text{si } 0 \leq x \leq V_0 \end{cases} \quad (5.33)$$

donde d es la constante que condicionará el comportamiento de la función. La Figura 5.5a nos muestra la forma del potencial utilizado, lo primero que notamos es que el espacio en el que pueden moverse las partículas dentro del potencial difiere al que existe en el oscilador armónico, limitando más el movimiento en esta región que el oscilador armónico. Tendremos pues tres casos para la ecuación de Schrödinger, si $|x_i| > V_0$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi_1''(x) + \frac{\mu^2\omega^2 V_0^2}{2}\psi_1 = E\psi_1$$

si $-V_0 \leq x \leq 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi_2''(x) + \frac{\mu^2\omega^2 x^2}{2}\psi_2 = E\psi_2$$

y si $0 \leq x \leq V_0$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi_3''(x) + \frac{\mu^2\omega^2 V_0 x}{2}\psi_3 = E\psi_3$$

En este caso, el problema no posee una solución analítica sencilla de manera que el tratamiento numérico es nuestra mejor alternativa. Este problema no posee simetría geométrica que podamos aprovechar, de modo que hemos de considerar la discretización en todo el espacio para así obtener relaciones de recurrencia correspondientes a cada región. Cuando $|x_i| > V_0$

$$\begin{aligned} A_{i,i} &= \left(\frac{\delta_{1,i}}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \right) \left(\frac{1}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) + \frac{V_0^2}{2} \\ A_{i,i-1} &= -\frac{1}{(x_i - x_{i-1})\sqrt{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_i - x_{i-2})}} \\ A_{i,i+1} &= -\frac{1}{(x_{i+1} - x_i)\sqrt{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+2} - x_i)}} \end{aligned} \quad (5.34)$$

como antes, lo único que cambia es el elemento del potencial. Entonces si $-V_0 \leq x_i \leq 0$

$$A_{i,i} = \left(\frac{1}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \right) \left(\frac{1}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) + \frac{x_i^2}{2} \quad (5.35)$$

y por ultimo si $0 \leq x_i \leq V_0$

$$A_{i,i} = \left(\frac{1}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \right) \left(\frac{1}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) + \frac{V_0 x_i}{2} \quad (5.36)$$

Como podemos ver en la Figura 5.5b el espectro de energías se encuentra desplazado hacia arriba respecto al del oscilador armónico infinito, de manera que, encontramos que la capacidad de confinamiento de este potencial es incluso mayor que la del oscilador armónico infinito y por lo tanto mayor que la de los ejemplos finitos anteriores. Considerando los resultados de los ejemplos anteriores y teniendo en cuenta que nuevamente existe una disminución en la región de confinamiento en que pueden encontrarse las partículas podemos decir que la relación entre la región de confinamiento y la capacidad de confinamiento es directa. En este caso al disminuir la región de confinamiento el espectro se desplaza hacia arriba indicandonos que las partículas en este sistema son más energéticas en su estado más bajo ya que al ser menor la región de confinamiento menos energía es necesaria para escapar de la barrera y por tanto las energías permitidas dentro de esta región aumentan.

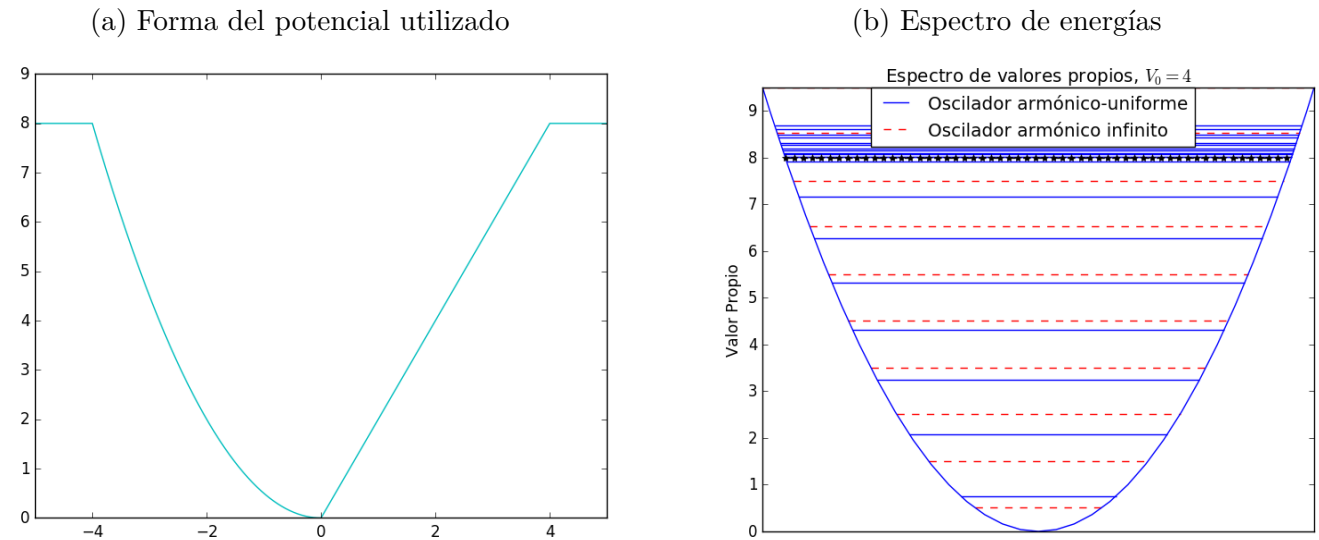


Figura 5.5: Nuevamente las líneas rojas representan los eigenvalores numéricos del oscilador armónico infinito y las azules los eigenvalores para el oscilador armónico-uniforme, con V_0 el valor usado para el cálculo del potencial de truncamiento representado con marcas negras. En este caso la malla utilizada es de 2000 puntos ya que se necesita la discretización en todo el rango debido a que el problema no posee simetría por el eje vertical.

5.5. Oscilador armónico truncado asimétrico

Este potencial es similar al de oscilador armónico truncado, sin embargo, una mitad se comporta como el oscilador armónico truncado y la otra mitad crece limitado por una constante. En este caso el potencial es el siguiente

$$V(x) = \begin{cases} \frac{\mu\omega^2 V_0^2}{2} & \text{si } |x| > V_0 \\ \frac{\mu\omega^2 x^2}{2} & \text{si } -V_0 \leq x \leq 0 \\ \frac{b\mu\omega^2 x^2}{2} & \text{si } 0 \leq x \leq V_0 \end{cases} \quad (5.37)$$

donde b es la constante que limita el crecimiento del potencial. La Figura 5.6a muestra las distintas formas del potencial utilizado. Como podemos observar, la forma del potencial en el lado positivo de x en la gráfica es tal que, el espacio de energía cinética es mayor mientras disminuye el valor de b . Tendremos pues tres casos para la ecuación de Schrödinger, si $|x| > V_0$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi_1''(x) + \frac{\mu\omega^2 V_0^2}{2}\psi_1 = E\psi_1$$

si $-V_0 \leq x \leq 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi_2''(x) + \frac{\mu\omega^2 x^2}{2}\psi_2 = E\psi_2$$

y si $0 \leq x \leq V_0$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi_3''(x) + \frac{b\mu\omega^2 x^2}{2}\psi_3 = E\psi_3$$

Al igual que el oscilador armónico truncado, en este problema se utilizan métodos numéricos como nuestra mejor alternativa para obtener una solución. Teniendo en cuenta nuevamente que el problema no posee alguna simetría que nos ayude a reducir los recursos de cálculo encontramos que la discretización nos lleva a las siguientes relaciones de recurrencia

$$\begin{aligned} A_{i,i} &= \left(\frac{1}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \right) \left(\frac{1}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) + \frac{V_0^2}{2} \\ A_{i,i-1} &= -\frac{1}{(x_i - x_{i-1})\sqrt{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_i - x_{i-2})}} \\ A_{i,i+1} &= -\frac{1}{(x_{i+1} - x_i)\sqrt{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+2} - x_i)}} \end{aligned} \quad (5.38)$$

como antes, lo único que cambia es el elemento de potencial, entonces si $-V_0 \leq x_i \leq 0$

$$A_{i,i} = \left(\frac{\delta_{1,i}}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \right) \left(\frac{1}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) + \frac{x_i^2}{2} \quad (5.39)$$

y por ultimo si $0 \leq x \leq V_0$

$$A_{i,i} = \left(\frac{\delta_{1,i}}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \right) \left(\frac{1}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) + \frac{bx_i^2}{2} \quad (5.40)$$

En este caso el comportamiento de los eigenvalores se debe a la falta de simetría del sistema, como podemos observar en la gráfica de las variaciones del potencial, al aumentar la región de confinamiento aumenta el espacio en el que se pueden encontrar las partículas y de acuerdo a lo encontrado en ejemplos anteriores aumenta su capacidad de confinamiento, de modo que, debemos esperar que los eigenvalores obtenidos aparezcan desplazados hacia abajo respecto a los del oscilador armónico. En la Figura 5.6b a 5.6f podemos comparar el espectro de eigenvalores para las diferentes variaciones del valor b en rojo respecto a los eigenvalores del oscilador armónico infinito en azul; se aprecia que la magnitud de los eigenvalores del mismo orden es cada vez menor mientras menor es el valor de b , justo el resultado que se esperaba. Incluso podemos concluir que aumentando la asimetría del sistema lo suficiente podríamos conseguir valores menores que el resto de los osciladores armónicos truncados estudiados en este capítulo.

Hemos encontrando el comportamiento que tienen distintos tipos de potenciales unidimensionales, en general, variaciones del problema del oscilador armónico infinito, lo que nos ha permitido no sólo encontrar valores muy próximos a los esperados en el oscilador armónico infinito, sistema cuya solución es conocida, además hemos podido observar que en aquellos sistemas donde las partículas tienen regiones similares de confinamiento, las energías en sus espectros tienen como límite superior las energías del oscilador armónico infinito debido a la pérdida en la capacidad de confinamiento. El potencial armónico uniforme y el truncado asimétrico nos permitieron confirmar la relación entre el aumento de la región de confinamiento y la capacidad de confinamiento del sistema, a través del desplazamiento hacia arriba o abajo del espectro con respecto al espectro del oscilador armónico. De manera que, con estos resultados hemos hecho una predicción sobre el comportamiento de sistemas con potenciales finitos, esta predicción se basa en los resultados de sistemas conocidos y en el comportamiento físico esperado de estos sistemas. Por otro lado fue posible simplificar problemas bidimensionales y aprender del comportamiento de sus soluciones en una dimensión, de modo que, podemos esperar un comportamiento similar de estos sistemas en dos dimensiones. Además, hemos podido verificar que nuestra herramienta de cálculo numérico también encuentra soluciones a problemas físicos y reproduce resultados previamente conocidos, así que, gracias a esto podemos poner a prueba nuestra herramienta en sistemas bidimensionales.

CAPÍTULO 5. APLICACIONES DEL TRATAMIENTO NUMÉRICO EN UNA DIMENSIÓN

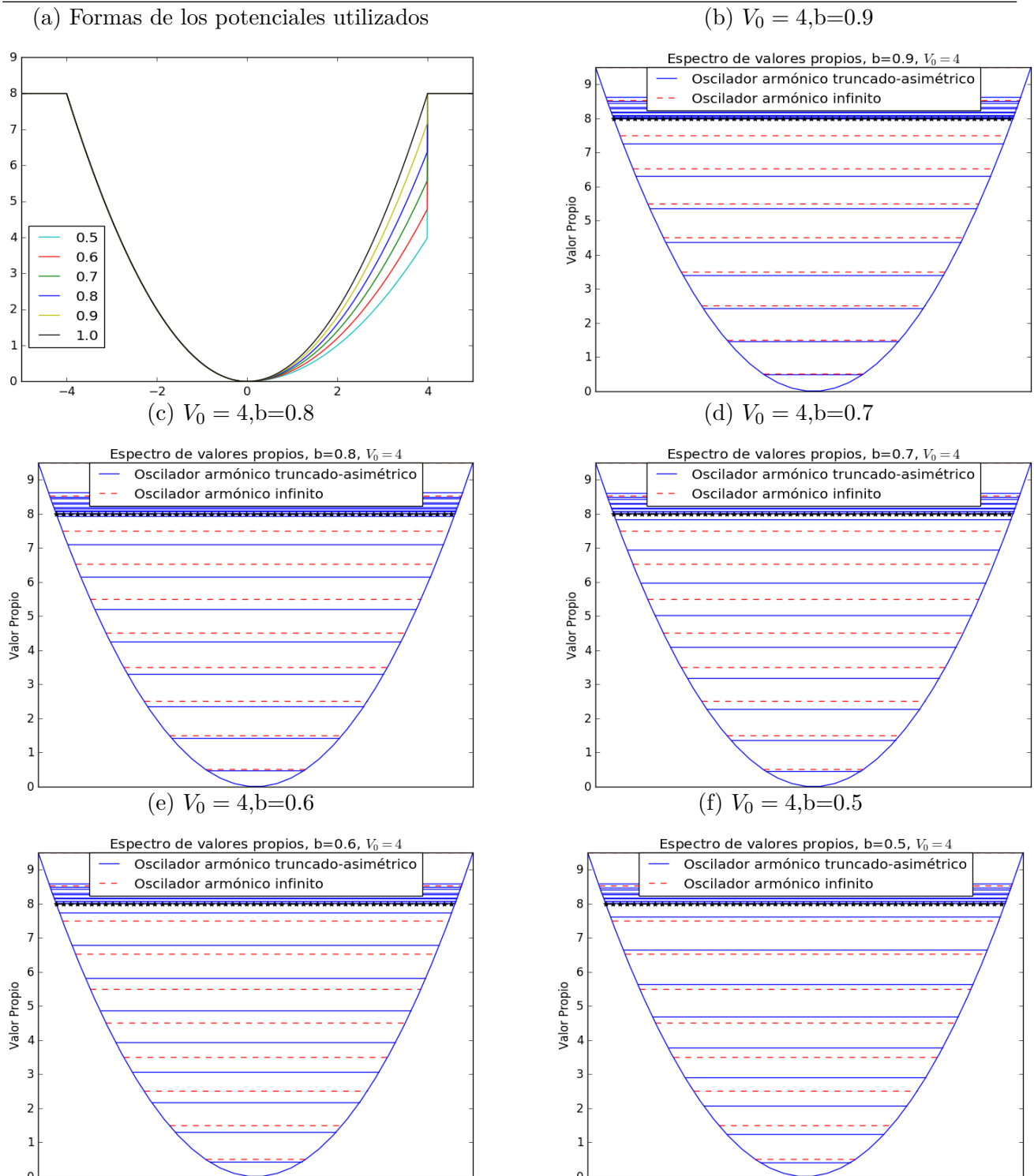


Figura 5.6: En las primeras gráficas podemos apreciar el espectro de eigenvalores para diferentes condiciones del potencial y la forma del potencial utilizado en cada caso. Aquí b es el parámetro que limita el crecimiento del potencial en la parte positiva del eje x y V_0 el valor usado para el cálculo del potencial de truncamiento representado con marcas negras. Las líneas rojas representan los eigenvalores numéricos del oscilador armónico infinito y las azules los eigenvalores para cada caso del oscilador armónico truncado-asimétrico. La malla utilizada es de 2000 puntos debido a que el problema no posee simetría por el eje vertical.

Aplicaciones del tratamiento numérico en dos dimensiones

Una vez desarrollados los sistemas unidimensionales podemos enfocar el trabajo a sistemas en dos dimensiones. De manera que ahora buscaremos estudiar algunos ejemplos físicos en dos dimensiones con geometría polar, ya que, si se realiza el tratamiento numérico de la manera correcta la discretización de estos sistemas no diferirá mucho de aquella encontrada en el problema de Helmholtz en dos dimensiones estudiado en el capítulo 4 y entonces podremos esperar que parte del desarrollo sea similar a este. Por otro lado, ya conocemos el comportamiento de las soluciones de algunos sistemas en una dimensión, así que esperamos que el comportamiento de estos en dos dimensiones sea al menos similar. Nuevamente buscamos reproducir resultados conocidos previamente e identificar el comportamiento de otros sistemas similares, así que, continuaremos con el estudio de osciladores armónicos y las variaciones de estos.

6.1. Oscilador armónico en 2 dimensiones

Buscaremos primero la solución analítica de la ecuación de Schrödinger en coordenadas polares para el oscilador armónico ya que así podremos comparar nuevamente los resultados obtenidos analíticamente con los eigenvalores encontrados numéricamente. De modo que consideremos la ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico en coordenadas polares

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + \frac{\mu\omega^2 \rho^2}{2} \right] \psi(\tilde{\mathbf{r}}) = E\psi(\tilde{\mathbf{r}}) \quad (6.1)$$

CAPÍTULO 6. APLICACIONES DEL TRATAMIENTO NUMÉRICO EN DOS DIMENSIONES

de nuevo podemos aplicar la separación de variables $\psi(\rho, \phi) = R(\rho)P(\phi)$ dejándonos las ecuaciones

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left[\frac{E2\mu}{\hbar^2} - \frac{\mu^2 \omega^2 \rho^2}{\hbar^2} - \frac{m^2}{\rho^2} \right] R = 0 \quad (6.2)$$

$$\frac{d^2 P}{d\phi^2} + m^2 P = 0 \quad (6.3)$$

la solución a la ecuación angular es

$$P(\phi) = C_1 e^{\pm im\phi}. \quad (6.4)$$

La solución a la ecuación radial es más elaborada, primero redefinamos $\beta = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}$ y $\rho = \beta r$ entonces

$$\frac{d}{d\rho} = \frac{dr}{d\rho} \frac{d}{dr} = \frac{1}{\beta} \frac{d}{dr} \text{ y } \frac{d^2}{d\rho^2} = \frac{1}{\beta^2} \frac{d^2}{dr^2},$$

de modo que la ecuación se reduce a

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR}{dr} + \left[\frac{2E}{\hbar\omega} - r^2 - \frac{m^2}{r^2} \right] R = 0. \quad (6.5)$$

Veamos que sucede si r es grande para saber el comportamiento asintótico de la ecuación, con lo que se obtiene la siguiente ecuación:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} - r^2 R = 0$$

esta ecuación implica que

$$R(r) \approx e^{-r^2/2}.$$

Por otro lado si r es pequeña

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{m^2}{r^2} R = 0 \quad (6.6)$$

entonces proponemos como solución

$$R(r) \approx r^l.$$

Si introducimos este último resultado en la ecuación diferencial entonces encontraremos

$$l(l-1)r^{l-2} + lr^{l-2} - m^2 r^{l-2} = 0 \text{ de modo que } l = m$$

así

$$R(r) \approx r^m$$

Ahora combinemos este comportamiento en una función pero completando con una serie de potencias buscando que esto nos entregue la solución correcta

$$R(r) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k r^{k+m} e^{-r^2/2} \quad (6.7)$$

buscamos introducir esto en la ecuación radial de modo que necesitamos

$$R'(r) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k e^{-r^2/2} ((k+m)r^{k+m-1} - r^{k+m+1})$$

$$R''(r) = \sum_{k=2}^{\infty} a_k ((k+m)(k+m-1)r^{k+m-2} - (k+m)r^{k+m} - (k+m+1)r^{k+m} + r^{k+m+2}) e^{-r^2/2}$$

al introducir esto en la ecuación radial obtenemos el polinomio

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k \left[\left(\frac{2E}{\hbar\omega} - \sum_{k=2}^{\infty} 2(k+m+1) \right) r^{k+m} + k(k+2m)r^{k+m-2} \right] = 0$$

Ahora, debido a que la suma es infinita llamamos k' al k usado hasta ahora y hacemos $k' \rightarrow k+2$ en el segundo elemento de la expresión anterior para poder obtener

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k \left[\left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 2(k+m+1) \right) r^{k+m} \right] + a_{k+2} [(k+2)(k+2+2m)r^{k+m}] = 0$$

si se debe satisfacer la condición es necesario que se cumpla la siguiente relación de recurrencia

$$a_{k+2} = -a_k \frac{\frac{2E}{\hbar\omega} - 2(k+m+1)}{(k+2)(k+2+2m)}$$

y notemos que

$$a_0 \left[\left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 2(m+1) \right) r^m \right] = 0 \quad \text{con } k=0 \text{ y}$$

$$a_1 \left[\left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 2(m+2) \right) r^{1+m} + (1+2m)r^{m-1} \right] = 0 \quad \text{con } k=1$$

El primer término con $k=0$ no tiene problema con ser cero cuando se cumpla la condición, pero para $k=1$ el término $(1+2m)r^{m-1}$ no puede hacerse cero de modo que $a_1=0$ y por la relación de recurrencia $a_1 = a_3 = a_5 = \dots = a_{2p+1} = 0$ de este modo nos quedamos sólo con los elementos pares. Por otro lado si k es muy grande entonces

$$a_{k+2} \approx a_k \frac{2}{k}$$

Esto causará una divergencia en la función de estado para nuestra k creciente pero esta conducta no describe apropiadamente el comportamiento del sistema, de modo que, para evitar este inconveniente buscamos limitar su crecimiento para un cierto valor n_r . De esta manera:

$$E = (n_r + |m| + 1)\hbar\omega \quad \text{con } m = 0, \pm 1, \pm 2 \quad (6.8)$$

estos son los eigenvalores de la función, las energías del sistema y guardan una estrecha relación con nuestro problema numérico principal [27]. Si introducimos estos valores en la expresión de a_{k+2} sabremos que el valor de corte será

$$a_{k+2} = a_k \frac{2(k-n_r)}{(k+2)(k+2+2m)}$$

CAPÍTULO 6. APLICACIONES DEL TRATAMIENTO NUMÉRICO EN DOS DIMENSIONES

De manera que, si hacemos $n_r \rightarrow 2n_r$ y $k \rightarrow 2k$ en la relación de recurrencia para a_{k+2} tendremos

$$a_{k+1} = a_k \frac{(k - n_r)}{(k + 1)(k + 1 + m)}.$$

Finalmente la solución de la ecuación de Schrödinger es

$$\Psi(\rho, \phi, t) = C_0 e^{\pm im\phi - \frac{iEt}{\hbar}} \sum_{k=0}^{\infty} a_k \left(\rho \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} \right)^{k+m} e^{-(\rho \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}})^2 / 2}. \quad (6.9)$$

Nuestro objetivo es resolver este problema de forma numérica con el objetivo de poder hacer modificaciones en los potenciales y estudiar las soluciones en sistemas que de otra manera resultaría complicado resolver. Este problema es muy similar a la discretización de la ecuación de Helmholtz, pero tomando en cuenta la intervención de los elementos de potencial. Para discretizar el potencial ha de tomarse en cuenta que $V(\rho, \theta) \rightarrow V_{i,j}$, entonces $V_{i,j}$ es el valor del potencial evaluado para los elementos de la malla (ρ_i, ϕ_j) de modo que, si aplicamos la discretización y consideramos unidades atómicas, las que tendremos en cuenta de ahora en adelante en cada discretización, encontraremos las relaciones de recurrencia para nuestra ecuación

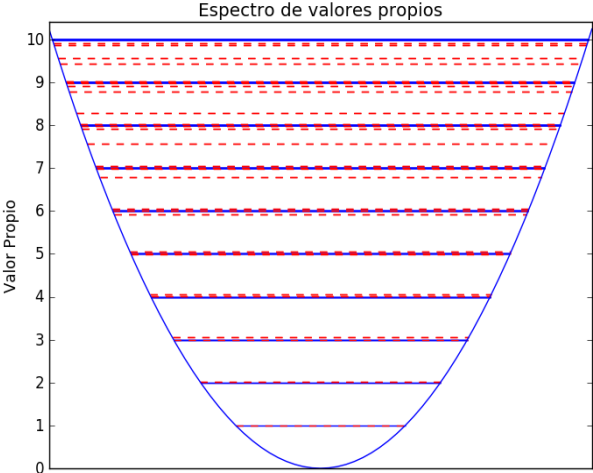
$$\begin{aligned} & \left\{ \left[\left(\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} \right) (1 - \delta_{1i}) + \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) \right] \frac{1}{\rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})} \right. \\ & + \left. \left[\left(\frac{1}{(\phi_j - \phi_{j-1})} \right) + \left(\frac{1}{(\phi_{j+1} - \phi_j)} \right) \right] \left(\frac{2}{\rho_i^2(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})} \right) + 2V_{i,j} \right\} \Psi_{i,j} \\ & - \frac{1}{\sqrt{\rho_i \rho_{i-1}(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})(\rho_i - \rho_{i-2})}} \left(\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} \right) \Psi_{i-1,j} \\ & - \frac{1}{\sqrt{\rho_{i+1} \rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})(\rho_{i+2} - \rho_i)}} \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) \Psi_{i+1,j} \\ & - \frac{2}{\rho_i^2(\phi_j - \phi_{j-1})\sqrt{(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})(\phi_j - \phi_{j-2})}} \Psi_{i,j-1} \\ & - \frac{2}{\rho_i^2(\phi_{j+1} - \phi_j)\sqrt{(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})(\phi_{j+2} - \phi_j)}} \Psi_{i,j+1} = 2E\Psi_{i,j} \end{aligned} \quad (6.10)$$

además el eigenvalor encontrado sera $\epsilon = 2E$. Por lo tanto, las relaciones de recurrencia para el oscilador armónico son las presentadas en las ecuaciones (6.9). Los eigenvalores aparecerán de acuerdo a la ecuación (6.8) y ya que $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ entonces esperamos que los eigenvalores aparezcan repetidos en $n + 1$ ocasiones con $n = 1, 2, \dots, etc$. Dicho de otro modo, que los valores tengan una degeneración $n + 1$. Como podemos observar en la Figura 6.1 los eigenvalores esperados y numéricos se encuentran muy cercanos pero los valores numéricos al igual que en el caso unidimensional disminuyen su precisión mientras aumenta el orden de excitación hasta despegarse bastante de los valores esperados en los casos de orden superior. Se busca una precisión de a lo más dos cifras significativas, ya que sólo se desea mostrar que es posible hallar el comportamiento degenerativo de los eigenvalores. Se puede ver que los valores numéricos

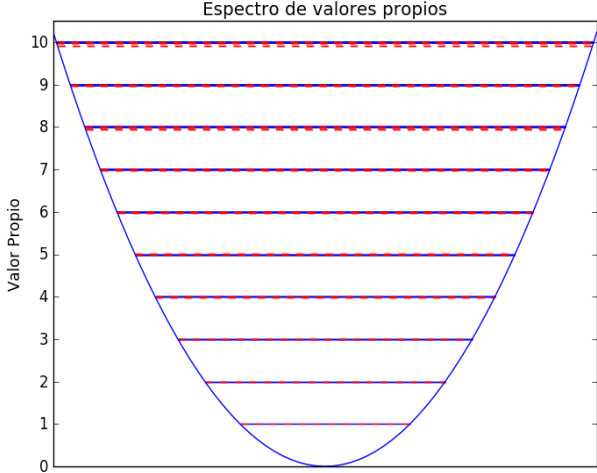
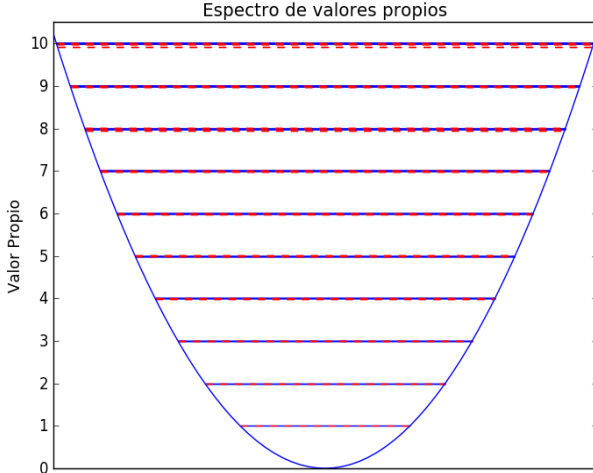
de orden más alto no parecen ajustarse a los esperados, en especial para aquellos con menos puntos en la malla, algo que como se explico previamente se debe a la mayor oscilación de las soluciones, este desdoblamiento se debe entonces al error numérico aun presente en nuestro método de cálculo y puede disminuirse refinando la malla utilizada. Esto puede verse en la Figura 6.1, de manera que, en adelante nos limitaremos a utilizar la malla de 200 puntos radiales y 1200 angulares ya que esta es la que mejor precisión de cálculo que nos brinda con el equipo de cómputo utilizado. Cabe mencionar que la degeneración del sistema se debe a la simetría angular del potencial como se muestra en la Figura 6.2. La matriz que se programó para obtener las eigenfunciones y eigenvalores se encuentra en la ecuación 6.10 y que a continuación se pone en términos de un solo índice, s , debido a que en este caso se tienen los índices i y j asociados a las coordenadas radial y angular respectivamente.

$$\begin{aligned}
 A_{s,s} &= \left\{ \left[\left(\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} \right) (1 - \delta_{1i}) + \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) \right] \frac{1}{\rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})} \right. \\
 &\quad \left. + \left[\left(\frac{1}{(\phi_j - \phi_{j-1})} \right) + \left(\frac{1}{(\phi_{j+1} - \phi_j)} \right) \right] \left(\frac{2}{\rho_i^2(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})} \right) + \rho_i^2 \right\} \\
 A_{s(i,j),s(i,j)-M} &= -\frac{1}{\sqrt{\rho_i \rho_{i-1} (\rho_{i+1} - \rho_{i-1}) (\rho_i - \rho_{i-2})}} \left(\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} \right) \\
 A_{s(i,j),s(i,j)+M} &= -\frac{1}{\sqrt{\rho_{i+1} \rho_i (\rho_{i+1} - \rho_{i-1}) (\rho_{i+2} - \rho_i)}} \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) \\
 A_{s(i,j),s(i,j)-1} &= -\frac{2}{\rho_i^2 (\phi_j - \phi_{j-1}) \sqrt{(\phi_{j+1} - \phi_{j-1}) (\phi_j - \phi_{j-2})}} \\
 A_{s(i,j),s(i,j)+1} &= -\frac{2}{\rho_i^2 (\phi_{j+1} - \phi_j) \sqrt{(\phi_{j+1} - \phi_{j-1}) (\phi_{j+2} - \phi_j)}}
 \end{aligned} \tag{6.11}$$

(a) 30 puntos radiales y 200 puntos angulares



(b) 200 puntos radiales y 700 puntos angulares



(c) 200 puntos radiales y 1200 puntos angulares

Figura 6.1: Comparación del espectro de energías para distintas configuraciones de la malla.

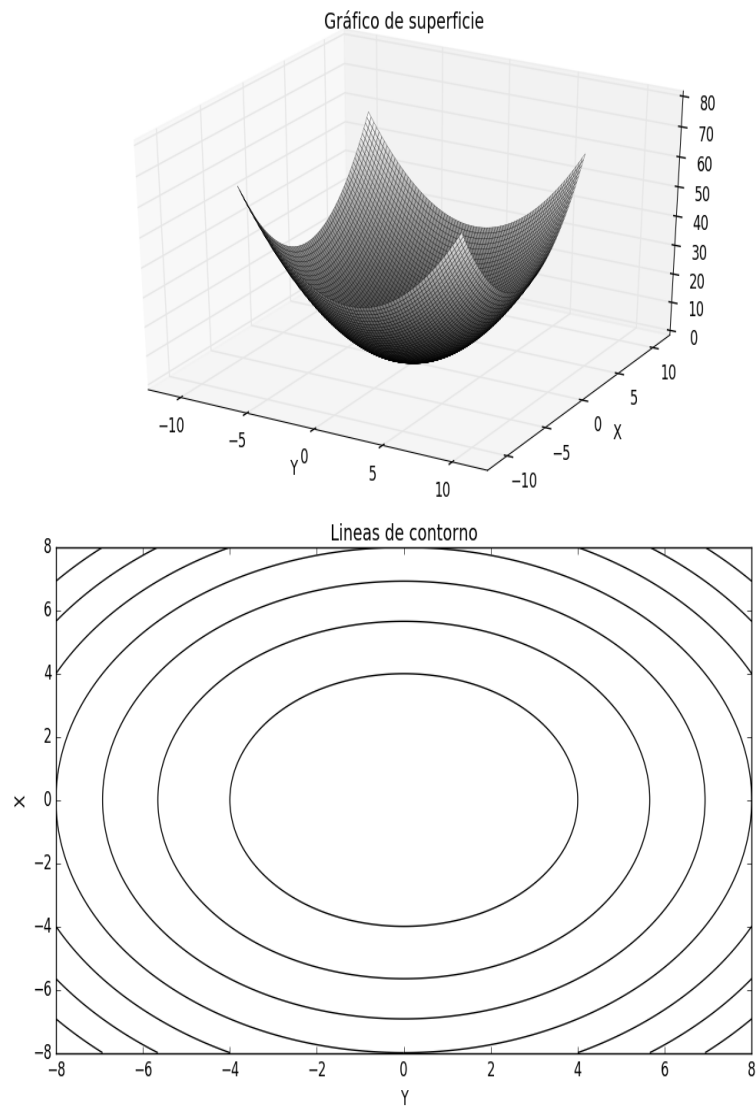


Figura 6.2: Gráficos de contorno y de las líneas de superficie del potencial.

6.2. Oscilador armónico truncado

Ahora haremos el estudio en dos dimensiones de algunos de los potenciales tratados anteriormente buscando nuevamente exhibir el comportamiento degenerativo de los eigenvalores debido a las simetrías en la geometría angular del sistema. El potencial del oscilador armónico truncado es similar al caso en una dimensión.

$$V(\rho) = \begin{cases} \frac{\mu\omega^2\rho^2}{2} & \text{si } \rho \leq R_0 \\ \frac{\mu\omega^2 R_0^2}{2} & \text{si } R_0 \leq \rho \end{cases} \quad (6.12)$$

entonces si $\rho \leq R_0$

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + \frac{\rho^2}{2} \right] \psi_1(\tilde{\mathbf{r}}) = E\psi_1(\tilde{\mathbf{r}})$$

y si $R_0 \leq \rho$

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + \frac{\mu\omega^2 R_0^2}{2} \right] \psi_2(\tilde{\mathbf{r}}) = E\psi_2(\tilde{\mathbf{r}})$$

utilizando las ecuaciones 6.10 notamos que esto se traduce en las relaciones de recurrencia

$$\begin{aligned} A_{s,s} &= \left\{ \left[\left(\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} \right) (1 - \delta_{1i}) + \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) \right] \frac{1}{\rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})} \right. \\ &\quad \left. + \left[\left(\frac{1}{(\phi_j - \phi_{j-1})} \right) + \left(\frac{1}{(\phi_{j+1} - \phi_j)} \right) \right] \left(\frac{2}{\rho_i^2(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})} \right) + \rho_i^2 \right\} \\ A_{s(i,j),s(i,j)-M} &= -\frac{1}{\sqrt{\rho_i \rho_{i-1} (\rho_{i+1} - \rho_{i-1}) (\rho_i - \rho_{i-2})}} \left(\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} \right) \\ A_{s(i,j),s(i,j)+M} &= -\frac{1}{\sqrt{\rho_{i+1} \rho_i (\rho_{i+1} - \rho_{i-1}) (\rho_{i+2} - \rho_i)}} \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) \\ A_{s(i,j),s(i,j)-1} &= -\frac{2}{\rho_i^2 (\phi_j - \phi_{j-1}) \sqrt{(\phi_{j+1} - \phi_{j-1}) (\phi_j - \phi_{j-2})}} \\ A_{s(i,j),s(i,j)+1} &= -\frac{2}{\rho_i^2 (\phi_{j+1} - \phi_j) \sqrt{(\phi_{j+1} - \phi_{j-1}) (\phi_{j+2} - \phi_j)}} \end{aligned} \quad (6.13)$$

y para $R_0 \leq \rho$ solo cambian los elementos de la diagonal principal

$$\begin{aligned} A_{s,s} &= \left\{ \left[\left(\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} \right) (1 - \delta_{1i}) + \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) \right] \frac{1}{\rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})} \right. \\ &\quad \left. + \left[\left(\frac{1}{(\phi_j - \phi_{j-1})} \right) + \left(\frac{1}{(\phi_{j+1} - \phi_j)} \right) \right] \left(\frac{2}{\rho_i^2(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})} \right) + R_0^2 \right\} \end{aligned} \quad (6.14)$$

En la Figura 6.3 se encuentran los gráficos de superficie y las líneas de contorno de los potenciales utilizados como ejemplos de las simulaciones realizadas para esta sección. Al igual que

en el caso unidimensional, en la Figura 6.4 podemos observar que las energías de ordenes bajos se encuentran bastante cercanos que los del oscilador armónico y estos comienzan a quedar por debajo de estos valores mientras más nos acercamos a la frontera de potencial. Encontramos nuevamente que la magnitud de los eigenvalores del oscilador armónico truncado es menor respecto a los del oscilador armónico debido a la menor capacidad de confinamiento que posee el sistema. Esta menor capacidad de confinamiento permite a la partícula encontrarse en regiones fuera del espacio de confinamiento a pesar de poseer una energía menor que la barrera de potencial. Sin embargo también podemos observar que al aumentar la magnitud de las energías se pierde el comportamiento degenerativo de los eigenvalores y surgen desdoblamientos alrededor de un valor entero, esto se manifiesta en la gráfica como líneas cuyo grosor aumenta con el orden y magnitud. Este es un comportamiento que no aparece en el oscilador armónico infinito ni en los osciladores armónicos en una dimensión de modo que parece un comportamiento particular de los osciladores armónicos truncados en dos dimensiones debido a la cercanía del eigenvalor con la barrera de potencial. Esta diferencia se debe a que se pierde precisión numérica con el aumento de la excitación en comparación con el oscilador armónico infinito donde teníamos un valor de la energía para diferentes estados. Por otro lado podemos observar que tanto en el caso en una y dos dimensiones es conveniente trabajar con valores de la barrera de potencial suficientemente grandes de manera que tengamos como resultado suficientes eigenvalores con los que podamos comparar el límite del tratamiento utilizado.

CAPÍTULO 6. APLICACIONES DEL TRATAMIENTO NUMÉRICO EN DOS DIMENSIONES

(a) $R_0 = 2$

(b) $R_0 = 3$

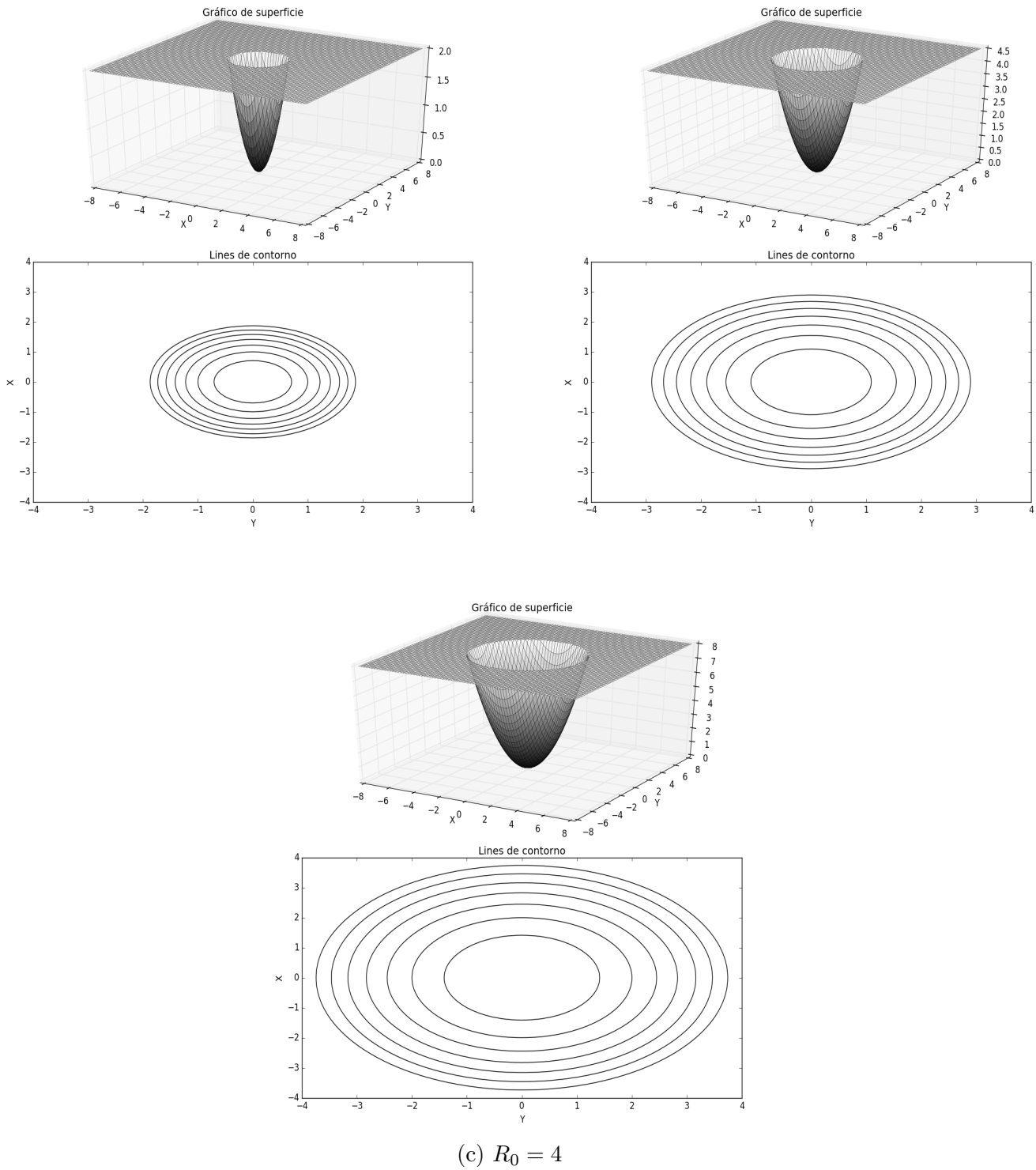


Figura 6.3: Gráficos de superficie y de líneas de contorno de los potenciales utilizados.

CAPÍTULO 6. APLICACIONES DEL TRATAMIENTO NUMÉRICO EN DOS DIMENSIONES

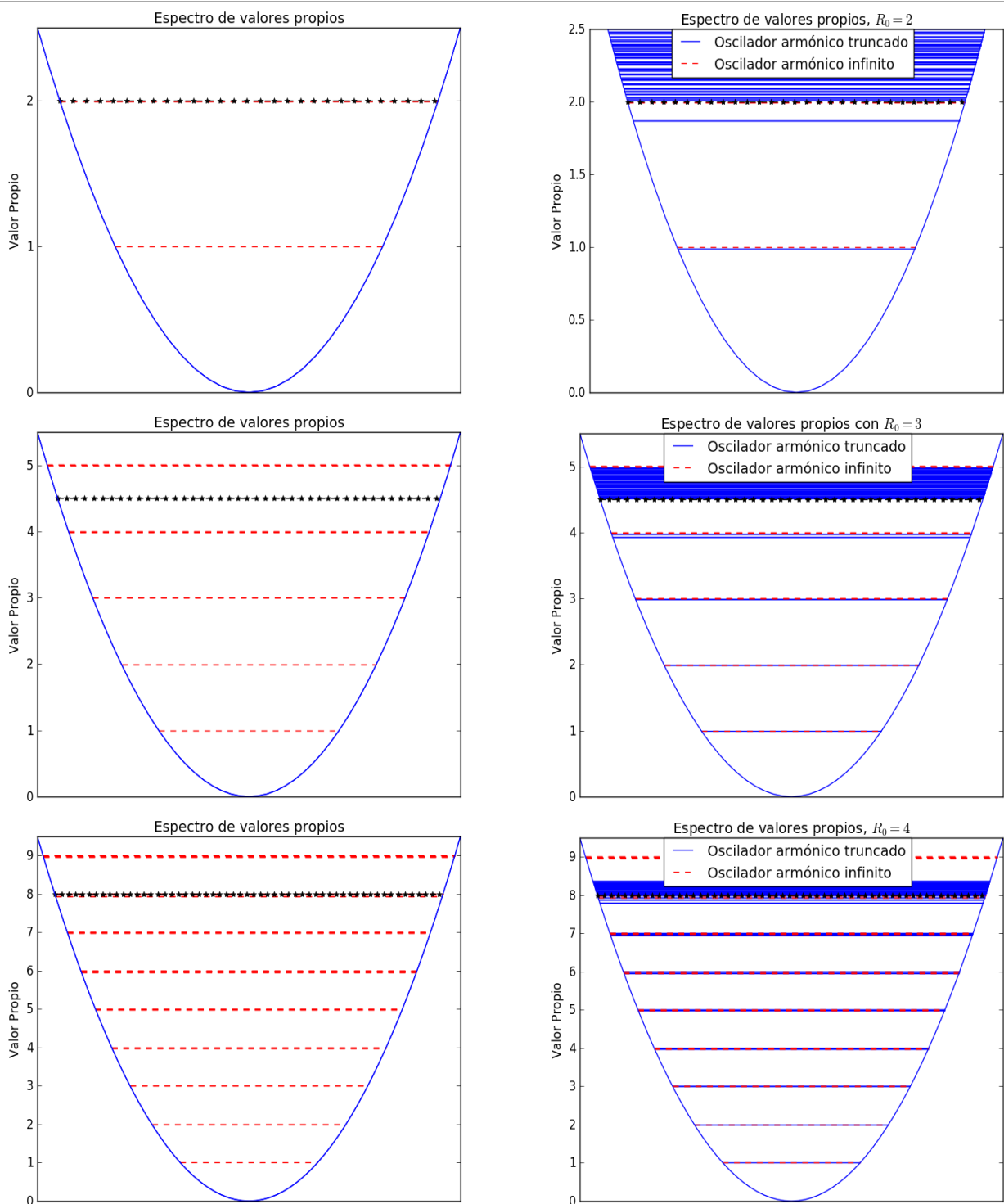


Figura 6.4: Comparación del espectro de eigenvalores para $R_0 = 2$, $R_0 = 3$ y $R_0 = 4$ para 200 puntos radiales y 1200 puntos angulares y comparativamente los valores del oscilador armónico. Las marcas negras representan el valor de truncamiento en cada caso.

6.3. Potencial asimétrico en un cuadrante

Consideraremos ahora un oscilador armónico truncado con una modificación en el comportamiento del potencial en uno de sus cuadrantes. Este es un ejemplo importante ya que nos es posible estudiar un sistema sin simetrías y debido a esto es un buen candidato para mostrar las capacidades de la herramienta numérica. Así, consideraremos que el sistema se comporta de la siguiente manera

$$V(\rho) = \begin{cases} \frac{\rho^2}{2} & \text{si } 0 \leq \phi < \frac{3\pi}{4} \text{ y } \rho \leq R_0 \\ \frac{\rho^4}{32} & \text{si } \frac{3\pi}{4} \leq \phi \leq 2\pi \text{ y } \rho \leq R_0 \\ cte & \text{si } R_0 \leq \rho. \end{cases} \quad (6.15)$$

El gráfico de superficie y las líneas de contorno para este caso se muestra en la Figura 6.5 y en el podemos observar que debido a la asimetría cuadrática del potencial, la región delimitada por el potencial es mayor que la del oscilador armónico truncado. Al discretizar la ecuación de Schroedinger, buscando resolver la ecuación numéricamente en coordenadas polares para un potencial que dependa de ambas coordenadas obtenemos las relaciones de recurrencia de la matriz de coeficientes. De modo que si se cumple $0 \leq \phi < \frac{3\pi}{4}$ y $\rho \leq R_0$ tenemos

$$\begin{aligned} A_{s,s} &= \left\{ \left[\left(\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} \right) (1 - \delta_{1i}) + \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) \right] \frac{1}{\rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})} \right. \\ &\quad \left. + \left[\left(\frac{1}{(\phi_j - \phi_{j-1})} \right) + \left(\frac{1}{(\phi_{j+1} - \phi_j)} \right) \right] \left(\frac{2}{\rho_i^2(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})} \right) + \rho_i^2 \right\} \\ A_{s(i,j),s(i,j)-M} &= -\frac{1}{\sqrt{\rho_i \rho_{i-1}(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})(\rho_i - \rho_{i-2})}} \left(\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} \right) \\ A_{s(i,j),s(i,j)+M} &= -\frac{1}{\sqrt{\rho_{i+1} \rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})(\rho_{i+2} - \rho_i)}} \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) \\ A_{s(i,j),s(i,j)-1} &= -\frac{2}{\rho_i^2(\phi_j - \phi_{j-1})\sqrt{(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})(\phi_j - \phi_{j-2})}} \\ A_{s(i,j),s(i,j)+1} &= -\frac{2}{\rho_i^2(\phi_{j+1} - \phi_j)\sqrt{(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})(\phi_{j+2} - \phi_j)}} \end{aligned} \quad (6.16)$$

por otro lado, si se cumple que $\frac{3\pi}{4} \leq \phi \leq 2\pi$ y $\rho \leq R_0$ solo es necesario modificar el elemento diagonal

$$\begin{aligned} A_{s,s} &= \left\{ \left[\left(\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} \right) (1 - \delta_{1i}) + \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) \right] \frac{1}{\rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})} \right. \\ &\quad \left. + \left[\left(\frac{1}{(\phi_j - \phi_{j-1})} \right) + \left(\frac{1}{(\phi_{j+1} - \phi_j)} \right) \right] \left(\frac{2}{\rho_i^2(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})} \right) + \frac{\rho_i^4}{2} \right\} \end{aligned} \quad (6.17)$$

por último si $R_0 \leq \rho$ tenemos

$$A_{s,s} = \left\{ \left[\left(\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} \right) (1 - \delta_{1i}) + \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) \right] \frac{1}{\rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})} + \left[\left(\frac{1}{(\phi_j - \phi_{j-1})} \right) + \left(\frac{1}{(\phi_{j+1} - \phi_j)} \right) \right] \left(\frac{2}{\rho_i^2(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})} \right) + R_0 \right\} \quad (6.18)$$

Los valores elegidos de R_0 serán aquellos que nos permitan comparar con los ejemplos estudiados anteriormente. Si analizamos el espectro de energías en la Figura 6.6 notamos que este presenta una pérdida de degeneración, lo cual se debe a la falta de simetría del sistema, sin embargo, también podemos destacar que el espectro se encuentra desplazado hacia abajo respecto al del oscilador armónico infinito ya que al igual que el caso anterior este es un potencial finito y por esto parte de las partículas escapan de la región de confinamiento, pero podemos notar que este se encuentra desplazado incluso más que el del oscilador armónico truncado y ya que lo único que se ha modificado respecto al problema anterior es el tamaño de la región de confinamiento a través de la modificación del comportamiento del potencial en este cuadrante, podemos asegurar que esto es un comportamiento propio de la solución y por tanto una consecuencia física del problema.

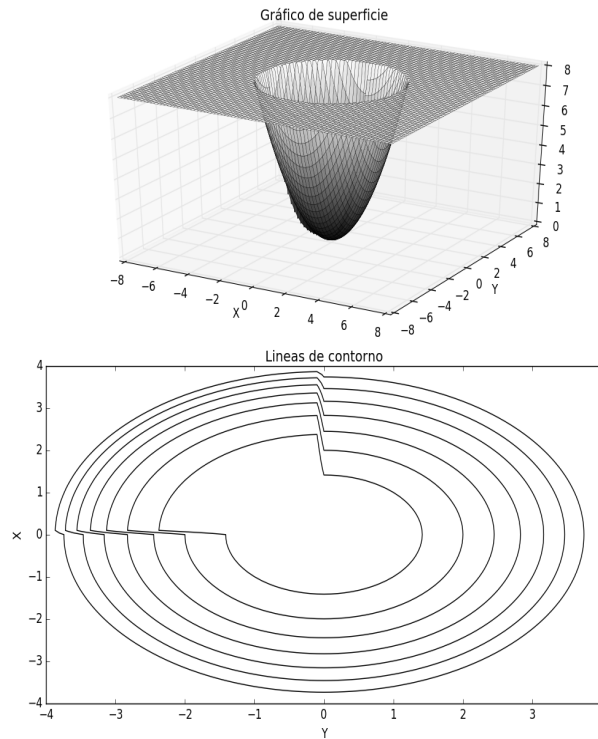


Figura 6.5: Gráfico de superficie del potencial utilizado y líneas de contorno con el valor de truncamiento en $cte = 8$.

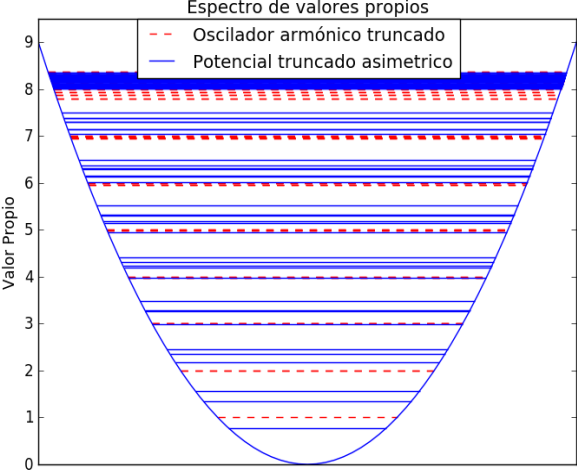


Figura 6.6: Espectro de eigenvalores para el oscilador armónico asimétrico en un cuadrante para 200 puntos radiales, 1200 angulares y $R_0 = 4$

6.4. Oscilador armónico truncado asimétrico

Continuando con el estudio de sistemas asimétricos consideramos en este caso un potencial donde la asimetría se extiende a la mitad de la región del sistema de manera que sea posible corroborar los resultados del caso anterior. El comportamiento de este potencial lo describimos como

$$V(\rho) = \begin{cases} \frac{\rho^2}{2} & \text{si } 0 \leq \phi < \pi \text{ y } \rho \leq R_0 \\ \frac{\rho^4}{32} & \text{si } \pi \leq \phi \leq 2\pi \text{ y } \rho \leq R_0 \\ cte & \text{si } R_0 \leq \rho \end{cases} \quad (6.19)$$

Tomaremos el valor de truncamiento como $cte = \frac{R_0^2}{2} = 8$ para nuevamente poder comparar con resultados anteriores del oscilador armónico truncado. La discretización del sistema dará como resultado 3 relaciones de recurrencia donde solo se modifica el término potencial. Si $0 \leq \phi < \pi$ y $\rho \leq R_0$

$$\begin{aligned} A_{s,s} &= \left\{ \left[\left(\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} \right) (1 - \delta_{1i}) + \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) \right] \frac{1}{\rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})} \right. \\ &\quad \left. + \left[\left(\frac{1}{(\phi_j - \phi_{j-1})} \right) + \left(\frac{1}{(\phi_{j+1} - \phi_j)} \right) \right] \left(\frac{2}{\rho_i^2(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})} \right) + \rho_i^2 \right\} \\ A_{s(i,j),s(i,j)-M} &= - \frac{1}{\sqrt{\rho_i \rho_{i-1}(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})(\rho_i - \rho_{i-2})}} \left(\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} \right) \\ A_{s(i,j),s(i,j)+M} &= - \frac{1}{\sqrt{\rho_{i+1} \rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})(\rho_{i+2} - \rho_i)}} \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) \\ A_{s(i,j),s(i,j)-1} &= - \frac{2}{\rho_i^2(\phi_j - \phi_{j-1})\sqrt{(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})(\phi_j - \phi_{j-2})}} \\ A_{s(i,j),s(i,j)+1} &= - \frac{2}{\rho_i^2(\phi_{j+1} - \phi_j)\sqrt{(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})(\phi_{j+2} - \phi_j)}} \end{aligned} \quad (6.20)$$

si $\pi \leq \phi \leq 2\pi$ y $\rho \leq R_0$

$$\begin{aligned} A_{s,s} &= \left\{ \left[\left(\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} \right) (1 - \delta_{1i}) + \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) \right] \frac{1}{\rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})} \right. \\ &\quad \left. + \left[\left(\frac{1}{(\phi_j - \phi_{j-1})} \right) + \left(\frac{1}{(\phi_{j+1} - \phi_j)} \right) \right] \left(\frac{2}{\rho_i^2(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})} \right) + \rho_i^4 \right\} \end{aligned} \quad (6.21)$$

y si $R_0 \leq \rho$

$$\begin{aligned} A_{s,s} &= \left\{ \left[\left(\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{\rho_i - \rho_{i-1}} \right) (1 - \delta_{1i}) + \left(\frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \right) \right] \frac{1}{\rho_i(\rho_{i+1} - \rho_{i-1})} \right. \\ &\quad \left. + \left[\left(\frac{1}{(\phi_j - \phi_{j-1})} \right) + \left(\frac{1}{(\phi_{j+1} - \phi_j)} \right) \right] \left(\frac{2}{\rho_i^2(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})} \right) + R_0 \right\} \end{aligned} \quad (6.22)$$

Las ecuaciones son similares a las del oscilador armónico truncado, sin embargo, la diferencia se encuentra en la división que hacemos sobre el espacio en el que trabajamos y como se comporta el potencial en cada región. El gráfico de superficie del potencial se puede observar la Figura 6.7 así como las líneas de contorno en el plano x, y y notamos que la región de energía cinética aumenta su tamaño por el comportamiento del potencial. Por lo tanto, la energía requerida para que las partículas puedan estar fuera de esta región es mayor. Este hecho, de acuerdo a lo que hemos encontrado en ejemplos anteriores nos hace esperar que los niveles de energía estén desplazados hacia abajo respecto a los del oscilador armónico truncado, respondiendo el sistema al aumento de su región de confinamiento. En la Figura 6.8 podemos observar los niveles de energía obtenidos y notamos que el espectro del oscilador asimétrico se encuentra desplazado hacia abajo respecto al espectro del oscilador armónico tal y como se esperaba. De este modo, podemos concluir que la capacidad de confinamiento del sistema es mayor a la del oscilador armónico truncado. Este resultado nuevamente nos lleva a concluir que existe una relación directa entre la región de confinamiento y la capacidad de confinamiento en el sistema, reflejada a su vez en el desplazamiento del espectro de energías respecto a sistemas con características similares.

El estudio de los sistemas en dos dimensiones nos ha permitido verificar las soluciones conocidas para el caso del oscilador armónico infinito bidimensional, donde hemos encontrado, al igual que en una dimensión, resultados cercanos a los valores esperados con una precisión de hasta tres cifras decimales, teniendo en cuenta que una mejor precisión requiere un refinamiento de la malla. Así fue posible observar el comportamiento degenerativo de los eigenvalores debido a la simetría en la geometría cilíndrica y gracias a esto fue posible estudiar sistemas más elaborados en dicha geometría, ya que las soluciones del oscilador armónico infinito sirven como base de comparación. De este modo, al estudiar el oscilador armónico truncado se notó que, al igual que en una dimensión, el oscilador armónico infinito sirve como límite superior para los eigenvalores de sistemas finitos debido a la menor capacidad de confinamiento de estos últimos sistemas siempre y cuando las regiones de confinamiento sean similares. Por otro lado encontramos que la pérdida de degeneración mientras los eigenvalores se acercan al valor de la barrera de potencial es un efecto que sólo aparece en los sistemas bidimensionales y se vuelve más notorio mientras crece la magnitud del potencial y el orden y magnitud del eigenvalor. Esto se debe a que en dicha región se va perdiendo precisión y se tendrá que trabajar con mallas con mayor refinamiento. Finalmente, usando como base los resultados del oscilador armónico hemos podido comprobar que los osciladores armónicos truncados asimétricos utilizados poseen una capacidad de confinamiento mayor que la del oscilador armónico truncado debido a su mayor región de confinamiento, corroborando así, la relación que existe entre la capacidad de confinamiento y la región de confinamiento presente a través del desplazamiento del espectro de energías respecto a otro de un sistema con características similares. Así, la herramienta desarrollada servirá para hacer simulaciones con potenciales más complicados y que se pueden representar con una geometría polar, ya que los únicos elementos que son afectados por el potencial son los que se encuentran en la diagonal de la matriz, a saber el potencial efectivo.

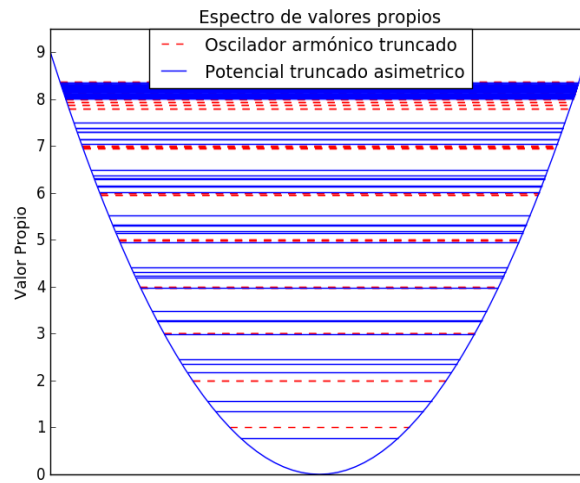


Figura 6.7: Espectro de eigenvalores para el oscilador armónico asimétrico para 200 puntos radiales, 1200 angulares y $R_0 = 4$

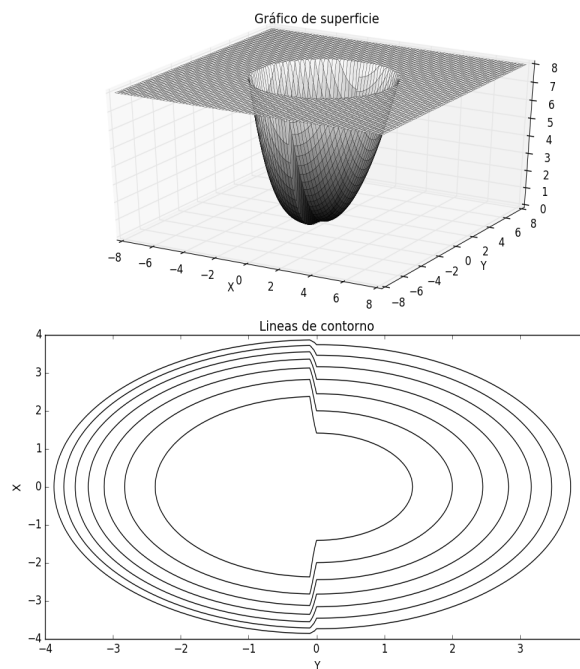


Figura 6.8: Gráfico del potencial utilizado con el valor de truncamiento en $\frac{R_0^2}{2} = 8$.

Resultados y conclusiones

7.1. Resultados

Al resolver la ecuación de Helmholtz en una dimensión encontramos que resulta más conveniente trabajar con el programa *eigs* de la paquetería *numpy* en lugar de el programa *tqli* ya que obtiene resultados más cercanos al valor esperado en menores tiempos. También obtuvimos gracias a *eigs* valores cercanos con una precisión de al menos 3 cifras decimales, sin embargo, esta capacidad de precisión se pierde mientras el orden del eigenvalor aumenta debido a las oscilaciones de las eigenfunciones de mayor orden.

La solución de la función de Bessel hizo posible mostrar que nuestro método obtiene las soluciones de la función de Bessel de orden n con suficiente precisión, permitiéndonos establecer comparaciones entre los resultados obtenidos y los ya conocidos para la ecuación de Bessel generando así mayor confianza en nuestro método de cálculo y permitiéndonos explorar diferentes aspectos en la geometría polar.

Posteriormente la solución de la ecuación de Helmholtz en 2 dimensiones muestra que utilizando una malla con esta geometría nos permite obtener precisión suficiente para mostrar que los eigenvalores se comportan de la manera esperada al caso analítico. Además, este comportamiento se reflejó en el espectro de eigenvalores de la función de Bessel en una dimensión ya que se obtuvieron las degeneraciones asociadas a la simetría angular presente. Esta solución también nos permitió encontrar los parámetros necesarios para obtener soluciones que nos permitieran estudiar el comportamiento de los eigenvalores, teniendo en cuenta que si se desea obtener una mejor precisión se requiere un refinamiento de la malla y esta puede variar con cada problema.

Las soluciones a casos de potenciales armónicos en una dimensión nos permitieron verificar que el método numérico funciona para resolver sistemas físicos más realistas puesto que estos son

sólo ligeras variaciones del problema matemático. Por otro lado en los osciladores truncados en una dimensión encontramos que estos ven limitada su capacidad de confinamiento de las partículas debido a que son finitos. Además pudimos encontrar la relación entre el tamaño de la región de energía cinética para las partículas que están confinadas en función de la barrera de potencial. Como se pudo apreciar, en los casos del oscilador armónico truncado y el escalón de potencial, cuando las regiones de confinamiento son iguales, los eigenvalores del oscilador armónico truncado y el escalón de potencial tienen como límite superior los eigenvalores del oscilador armónico infinito.

El oscilador armónico infinito bidimensional nos permitió, además de verificar los resultados esperados, confirmar que nuestra herramienta es capaz de encontrar el comportamiento degenerativo de los eigenvalores, comportamiento debido a la simetría angular del sistema. Al estudiar el oscilador armónico truncado se observó la pérdida del comportamiento degenerativo de las soluciones, destacando el agrupamiento de los eigenvalores alrededor de valores enteros, mostrado en las gráficas un ensanchamiento de las líneas de los eigenvalores lo cual es más notorio mientras el orden y magnitud de los eigenvalores crece. Además se notó que al igual que en una dimensión los eigenvalores del potencial bidimensional sirven como un límite superior para este tipo de sistemas. Finalmente pudimos observar en el espectro de energías de los sistemas asimétricos que aquellas energías de órdenes más bajos, y por consecuencia todo el espectro, se hallan desplazadas hacia abajo respecto a las energías del oscilador armónico truncado. Este efecto se hace presente cuando introducimos asimetrías en el sistema, modificando la región de confinamiento y aumentando a su vez la región de la asimetría, el desplazamiento de los energías es más notorio. Así podemos corroborar la relación existente entre la región y la capacidad de confinamiento del sistema, notando que, mientras mayor es la región de confinamiento mayor es la capacidad de confinamiento del sistema y por lo tanto más difícil es para las partículas escapar de esta ya que requieren de una mayor energía para lograrlo.

7.2. Conclusiones

Podemos concluir que el método numérico halla soluciones para diferentes problemas que coinciden con el comportamiento esperado en cada sistema, siempre teniendo en cuenta que la precisión depende del tipo y finura de la malla utilizada en cada caso. Gracias a esto y basados en que las soluciones a estos problemas son correctas con la precisión dependiente del tamaño de la malla, podemos describir el comportamiento de sistemas físicos complejos en regiones geométricas en las que de otra manera resultaría complicado resolver el problema para conocer su comportamiento. Esto resulta útil ya que, utilizando estos resultados, podemos ofrecer una guía a experimentos reales donde las mediciones parezcan no estar de acuerdo con los resultados esperados. Finalmente podemos mencionar que se encontró la relación directa que existe entre la capacidad de confinamiento del sistema y el tamaño de la región de confinamiento en potenciales con características similares a los del oscilador armónico cuántico, pero con geometrías más complicadas.

7.3. Trabajo futuro

El tratamiento de sistemas físicos reales en dos y tres dimensiones parece el camino indicado para continuar en esta línea de investigación, dichas soluciones permitirán ofrecer una guía para experimentos donde geometrías complejas dificulten la interpretación de los resultados obtenidos. Además, este tipo de modelos ofrecen un entendimiento más claro sobre el rompimiento de la degeneración que hay en sistemas con geometría cilíndrica. Finalmente considerar la implementación de computo en paralelo nos permitiría aumentar la velocidad de cálculo.

Comparación de tiempos de cálculo

A pesar de que no es el objetivo central del trabajo presentamos los tiempos de cálculo en el caso de Bessel, comparando los tiempos obtenidos para el método de cálculo utilizado y para el método de diferencias finitas centradas. En la Figura A.1 podemos observar los tiempos de cálculo para ambos casos cuando se calculan los 5 primeros valores propios para J_0 y J_1 . Como vemos, en general, el método utilizado en este trabajo obtiene tiempos de cálculo menores al aumentar el número de puntos que el de diferencias finitas centradas gracias a que con el método utilizado la matriz asociada es hermitiana lo que no sucede al aplicar el método de diferencias finitas centradas.

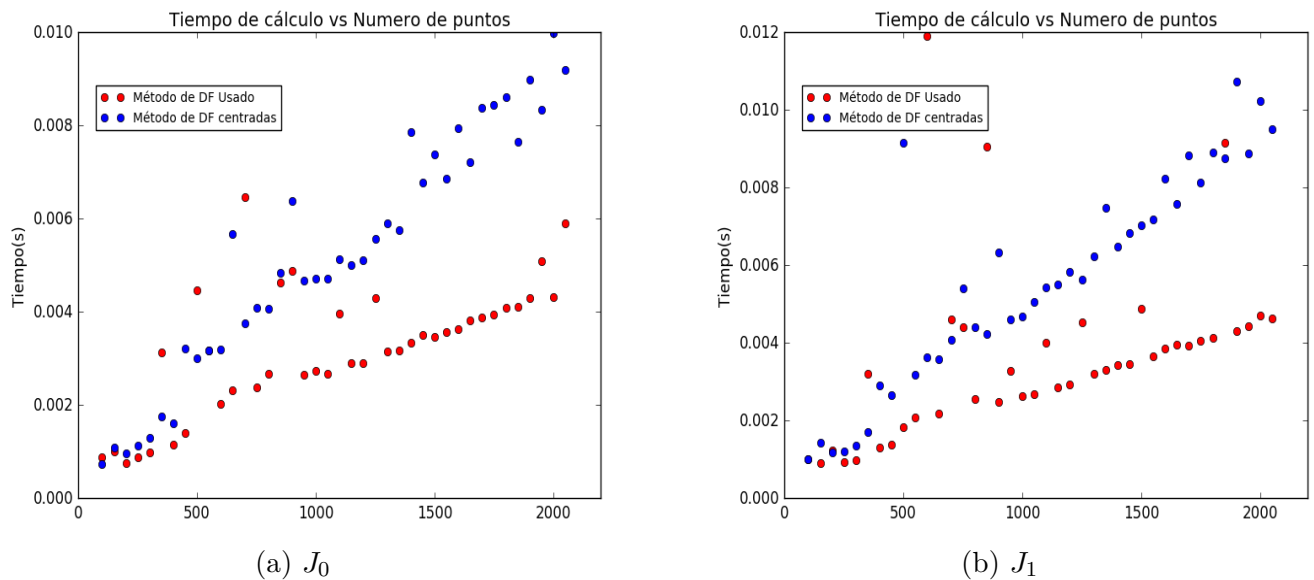


Figura A.1: Comparación del tiempo de cálculo de los primeros 5 valores de la función de Bessel J_0 y J_1 contra el número de puntos utilizados.

Matrices de Householder y eigenvalores de una matriz tridiagonal

Una matriz de Householder \mathbb{H} es aquella que permite una reflexión de un vector \vec{x} con respecto a un plano perpendicular a \vec{w} , cuentan con distintas propiedades, entre ellas se encuentra ser ortogonales, de modo que podemos tomar ventaja de esto para calcular matrices semejantes. En particular nos interesa tridiagonalizar una matriz \mathbb{A} de $N \times N$ simétrica formada por n vectores \vec{x} de longitud n y estas matrices nos permiten eliminar los elementos por debajo y por encima de las subdiagonales multiplicándolas por la izquierda y derecha. Como se sugiere en [25, 26] para mostrar en general como funciona este procedimiento consideremos la transformación de Householder formada por

$$\mathbb{H} = \mathbb{I} - 2\vec{w}\vec{w}^T. \quad (\text{B.1})$$

donde \mathbb{I} es la matriz identidad. Buscamos eliminar los elementos por debajo del elemento subdiagonal $\mathbb{A}_{k,k+1}$ tomamos el k -ésimo vector \vec{x} y hacemos

$$\vec{u}' = \vec{x} - \sum_{i=1}^k x_i \vec{e}_i \quad (\text{B.2})$$

donde $\vec{e}_i = [0, \dots, 0, 1_i, 0, \dots, 0]$ o sea el vector de la misma longitud que \vec{u}' y con solo un uno en la i -ésima entrada. Ahora tomamos

$$\vec{u} = \vec{u}' \pm |\vec{u}'| \vec{e}_{k+1} \quad (\text{B.3})$$

y finalmente construimos el vector necesario para la matriz con

$$\vec{w} = \frac{\vec{u}}{|\vec{u}|} \quad (\text{B.4})$$

Aplicaremos \mathbb{H} a \mathbb{A} en $n - 2$ ocasiones por la izquierda y derecha obtendremos para obtener la matriz tridiagonal buscada. Una vez reducida nuestra matriz aplicamos la factorización QR

APÉNDICE B. MATRICES DE HOUSEHOLDER Y EIGENVALORES DE UNA MATRIZ TRIDIAGONAL

con traslaciones como se explica en [25, 26]. A continuación presentamos un ejemplo de este procedimiento, partamos de la siguiente matriz

$$\mathbb{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 5 & 6 & 7 \\ 3 & 6 & 8 & 9 \\ 4 & 7 & 9 & 10 \end{bmatrix} \quad (\text{B.5})$$

consideremos primero $x^T = (1, 2, 3, 4)$, entonces

$$u'^T = (0, 2, 3, 4) \quad (\text{B.6})$$

entonces

$$u^T = (0, 2 + \sqrt{29}, 3, 4) \quad (\text{B.7})$$

hemos tomado el signo positivo por pura conveniencia, sin embargo, el tomar el mismo signo que x_{k+1} disminuye el error de redondeo según menciona [25, 26]. Calculamos entonces \mathbb{H}_1 y multiplicamos por ambos lados para obtener la nueva matriz \mathbb{A}_1

$$\mathbb{A}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 5,38516 & 0 & 0 \\ 5,38516 & 22,4828 & 2,66114 & 0,762762 \\ 0 & 2,66114 & 0,187215 & 0,165236 \\ 0 & 0,762762 & 0,165236 & 0,330027 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.8})$$

repitiendo este proceso para $x^T = (5,38516, 22,4828, 2,66114, 0,762762)$ tenemos que

$$u'^T = (0, 0, 2,66114, 0,762762) \quad (\text{B.9})$$

y

$$u^T = (0, 0, -0,107158, 0,762762) \quad (\text{B.10})$$

con esto calculamos \mathbb{H}_2 y finalmente obtenemos

$$\mathbb{B} = \begin{bmatrix} 1 & 5,38516 & 0 & 0 \\ 5,38516 & 22,4828 & 2,66114 & 0,762762 \\ 0 & 2,66114 & 0,187215 & 0,165236 \\ 0 & 0,762762 & 0,165236 & 0,330027 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.11})$$

Ahora aplicaremos la factorización QR con traslaciones l veces a esta matriz

$$\mathbb{A} - s_l \mathbb{I} = \mathbb{Q}_l \mathbb{R}_l \quad (\text{B.12})$$

usando el método presentado en [25, 26]. Para esto comenzamos con la submatriz de la esquina inferior derecha

$$\mathbb{S}\mathbb{B} = \begin{bmatrix} 0,187215 & 0,165236 \\ 0,165236 & 0,330027 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.13})$$

APÉNDICE B. MATRICES DE HOUSEHOLDER Y EIGENVALORES DE UNA MATRIZ TRIDIAGONAL

Calculamos las raíces correspondientes a esta y elegimos la mas cercana a $\mathbb{S}\mathbb{B}_{2,2}$ que resulta ser $s_1 = 0,0786154050$ y de la factorización obtenemos que

$$\mathbb{Q}_1\mathbb{R} = \begin{bmatrix} -0,168646 & 0,476712 & 0,814336 & -0,284886 \\ -0,985677 & -0,0815639 & -0,13933 & 0,0487431 \\ 0 & 0,875267 & -0,45651 & 0,159705 \\ 0 & 0 & 0,330215 & 0,943906 \end{bmatrix} \times \quad (\text{B.14})$$

$$\times \begin{bmatrix} -5,46342 & -22,9914 & -2,72865 & 0 \\ 0 & 3,16281 & -0,0446365 & -0,155775 \\ 0 & 0 & -0,538964 & 0,131782 \\ 0 & 0 & 0 & 0,116029 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.15})$$

Al hacer la multiplicación inversa obtenemos

$$\mathbb{B} = \mathbb{R}_1\mathbb{Q}_1 = \begin{bmatrix} 23,5835 & -3,11751 & 0 & 0 \\ -3,11751 & -0,29704 & -0,471737 & 0 \\ 0 & -0,471737 & 0,289559 & 0,0383146 \\ 0 & 0 & 0,0383146 & 0,109521 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.16})$$

Si repetimos este procedimiento para la nueva matriz \mathbb{B} obtendremos que $s_2 = 0,10170607$ y al hacer la factorización y el producto inverso encontramos

$$\mathbb{B} = \mathbb{R}_2\mathbb{Q}_2 = \begin{bmatrix} 23,8816 & 0,12286 & 0 & 0 \\ 0,12286 & -0,954507 & 0,202257 & 0 \\ 0 & 0,202257 & 0,347022 & -0,000441664 \\ 0 & 0 & -0,000441664 & 0,000459261 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.17})$$

Con un par de iteraciones mas encontramos que $s_3 = 0,00045920$, $s_4 = 0,00000006$ y la resultante es

$$\mathbb{B} = \mathbb{R}_2\mathbb{Q}_2 = \begin{bmatrix} 23,8776 & 0,000209033 & 0 & 0 \\ 0,000209033 & -0,989766 & 0,029354 & 0 \\ 0 & 0,029354 & 0,37249 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.18})$$

Una vez obtenido esto calculamos el eigenvalor con ocho cifras decimales $\lambda_1 = s_1 + s_2 + s_3 + s_4 = 0,18491358$, hacemos $\mathbb{B}_{4,4} = \lambda_1$ y tomamos ahora la submatriz

$$\mathbb{S}\mathbb{B} = \begin{bmatrix} -0,989766 & 0,029354 \\ 0,029354 & 0,37249 \end{bmatrix} \quad (\text{B.19})$$

y repetimos el procedimiento una vez más para obtener que ahora $s_1 = 0,37312261$ y

$$\mathbb{B} = \mathbb{R}_2\mathbb{Q}_2 = \begin{bmatrix} 23,5045 & 7,03291e^{-7} & 0 & 0 \\ 7,03291e^{-7} & -1,36352 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.20})$$

APÉNDICE B. MATRICES DE HOUSEHOLDER Y EIGENVALORES DE UNA MATRIZ TRIDIAGONAL

Ahora calculamos el eigenvalor como $\lambda_2 = \lambda_1 + s_1 = 0,55803620$. Por último queda calcular el eigenvalor de la submatriz

$$\mathbb{S}\mathbb{B}_2 = \begin{bmatrix} 23,5045 & 7,03291e^{-7} \\ 7,03291e^{-7} & -1,36352 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.21})$$

esto da como resultado las raíces $r_1 = 23,50449892$ y $r_2 = -1,36352111$ y entonces $\lambda_3 = r_2 + \lambda_2 = -0,80548491$ y $\lambda_4 = r_1 + \lambda_1 = 24,06253512$. Hemos encontrado los 4 eigenvalores asociados a esta matriz y así la matriz diagonalizada es

$$\mathbb{B} = \begin{bmatrix} 24,06253512 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0,80548491 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,55803620 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,18491358 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.22})$$

Programas de computo realizados

El cálculo numérico se realizó guardando los términos de las relaciones de recurrencia de la ecuación deseada en una matriz \mathbb{A} de $N \times N$. Para esto fue necesario crear una malla que representara el espacio discretizado de nuestro sistema, esto se hizo asignando a cada variable un vector cuya longitud dependía de la división necesaria en cada caso, teniendo en cuenta que esto también determinó el tamaño de nuestra matriz. Una vez se obtuvo la discretización de nuestra matriz se calculan los eigenvalores y eigenvectores en cada caso, ya que estos incluyen las soluciones a la ecuación diferencial. Para esto se han utilizado los programas *eigs* de la paquetería incluida en Julia y *tqli* extraído de [25], sin embargo, el uso de *tqli* fue descartado debido a que *eigs* mostró mejor desempeño. Los resultados se guardan en archivos de texto para posteriormente ser leídos y graficados utilizando la paquetería de *PyPlot*.

Bibliografía

- [1] W. Jaskólski, *Physics Reports* 271, 1 (1996).
- [2] K. Sen, *Electronic Structure of Quantum Confined Atoms and Molecules*, SpringerLink : Bucher (Springer International Publishing, 2014).
- [3] A. D. Yoffe, *Advances in Physics* 50, 1 (2001),
<http://dx.doi.org/10.1080/00018730010006608>.
- [4] A. D. Yoffe, *Advances in Physics* 51, 799 (2002),
<http://dx.doi.org/10.1080/00018730110117451>.
- [5] S. A. Cruz, J. Sabin, and E. Brandas, eds., *Advances in Quantum Chemistry*, Vol. 57 (Elsevier, 2009) p. 308.
- [6] A. Michels, J. D. Boer, and A. Bijl, *Physica* 4, 981 (1937).
- [7] R. Cabrera-Trujillo and S. A. Cruz, *Nucl. Instr. and Meth. B* 320, 51 (2014).
- [8] H. E. Montgomery and K. D. Sen, *Phys. Lett. A* 376, 1992 (2012).
- [9] R. Cabrera-Trujillo and S. A. Cruz, *Phys. Rev. A* 87, 012502 (2013).
- [10] S. Goldman and C. Joslin, *The Journal of Physical Chemistry* 96, 6021 (1992),
<http://dx.doi.org/10.1021/j100193a069>.
- [11] P. O. Fröman, S. Yngve, and N. Fröman, *Journal of Mathematical Physics* 28, 1813 (1987),
<http://dx.doi.org/10.1063/1.527441>.
- [12] A. Michels, J. D. Boer, and A. Bijl, *Physica* 4, (1937) 981.
- [13] L. Stevanović, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 43, 165002 (2010).
- [14] J. Connerade, *AIP Conference Proceedings* 1197, 1(2009).
- [15] C. Laughlin, *Perturbation Theory for a Hydrogen-like Atom Confined Within an Impenetrable Spherical Cavity*, (2009).

BIBLIOGRAFÍA

- [16] Maris E. Changa, Andrei V. Scherbinin and Vladimir I. Pupyshev, Perturbation theory for the hydrogen atom in a spherical cavity with off-centre nucleus, (1999).
- [17] R. Cabrera-Trujillo, R. Méndez-Fragoso, S. A. Cruz, Energy Level Structure of the Hydrogen Atom Confined by a Penetrable Cylindrical Cavity, (2016).
- [18] S. Safwan, N. E. Meshed, A. Asmaa, and M. Hekmat, *Physica B: Condensed Matter* 404, (2009) 2294.
- [19] G. W. Bryant, *Phys. Rev. B* 29, 6632 (1984).
- [20] S. A. Ndengué, O Motapon, R. L. Melingui Melono and A. J. Etindele, Electronic structure of a cylindrically confined hydrogen atom by the B-splines method: energy levels and dipole polarizability, (2014)
- [21] George B. Arfken, Hans J. Weber, Frank E. Harris-Mathematical Methods for Physicists, Seventh Edition, A Comprehensive Guide, Academic Press, (2012).
- [22] L. de la Peña, Introducción a la Mecánica Cuántica, Ediciones Científicas Universitarias, Serie de Texto Científico Universitario, Fondo de Cultura Económica, (2006).
- [23] William E. Boyce. Richard C. Diprima, Ecuaciones Diferenciales y Problemas con Valores en la Frontera, Rensselaer Polytechnic Institute, Cuarta Edición, Edición impresa Limusa-Wiley.
- [24] Richard Haberman, Applied Partial Differential Equations With Fourier Series and Boundary Value Problems, Fourth Edition, Pearson Prentice Hall, China Machine Press, (2004).
- [25] William H. Press, Brian P. Flannery, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, Numerical Recipes in C, The Art of Scientific Computing, Cambridge University Press, (1992).
- [26] J. H. Mathews, K. D. Fink, Métodos Numéricos con Matlab, Tercera Edición, Prentice Hall, Madrid, (2000).
- [27] Bipin R. Desai, Quantum Mechanics with Basic Field Theory, Cambridge University Press, New York, (2009), pp 203-207.
- [28] D.I. Blokhintsev, Quantum Mechanics, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht-Holland, 1964.
- [29] Nakhlé H. Asmar, Partial Differential Equations with Fourier Series and Boundary Value Problems, Second Edition, University of Missouri, Pearson, Prentice Hall, pp 237-240.
- [30] M. Abramowitz, I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables, National Bureau of Standards, (1970), pp 409.