



CARTA DE AUTORIZACIÓN

CÓDIGO

AP-BIB-FO-06

VERSIÓN

1

VIGENCIA

2014

PÁGINA

1 de 2

Neiva, 11 de Noviembre de 2022

Señores

CENTRO DE INFORMACIÓN Y DOCUMENTACIÓN

UNIVERSIDAD SURCOLOMBIANA

Ciudad

El (Los) suscrito(s):

Juan David Lara Barrero, con C.C. No. 1.110.602.891,

_____, con C.C. No. _____,

_____, con C.C. No. _____,

_____, con C.C. No. _____,

Autor(es) de la tesis y/o trabajo de grado o _____

Titulado: "Teoría Cuántica del Péndulo aplicada al Etano y Hexacloroplatinato de Potasio"

presentado y aprobado en el año 2022 como requisito para optar al título de

__ Físico __;

Autorizo (amos) al CENTRO DE INFORMACIÓN Y DOCUMENTACIÓN de la Universidad Surcolombiana para que, con fines académicos, muestre al país y el exterior la producción intelectual de la Universidad Surcolombiana, a través de la visibilidad de su contenido de la siguiente manera:

- Los usuarios puedan consultar el contenido de este trabajo de grado en los sitios web que administra la Universidad, en bases de datos, repositorio digital, catálogos y en otros sitios web, redes y sistemas de información nacionales e internacionales "open access" y en las redes de información con las cuales tenga convenio la Institución.
- Permita la consulta, la reproducción y préstamo a los usuarios interesados en el contenido de este trabajo, para todos los usos que tengan finalidad académica, ya sea en formato Cd-Rom o digital desde internet, intranet, etc., y en general para cualquier formato conocido o por conocer, dentro de los términos establecidos en la Ley 23 de 1982, Ley 44 de 1993, Decisión Andina 351 de 1993, Decreto 460 de 1995 y demás normas generales sobre la materia.
- Continúo conservando los correspondientes derechos sin modificación o restricción alguna; puesto que, de acuerdo con la legislación colombiana aplicable, el presente es un acuerdo jurídico que en ningún caso conlleva la enajenación del derecho de autor y sus conexos.

Vigilada Mineducación

La versión vigente y controlada de este documento, solo podrá ser consultada a través del sitio web Institucional www.usco.edu.co, link Sistema Gestión de Calidad. La copia o impresión diferente a la publicada, será considerada como documento no controlado y su uso indebido no es de responsabilidad de la Universidad Surcolombiana.



CARTA DE AUTORIZACIÓN

CÓDIGO

AP-BIB-FO-06

VERSIÓN

1

VIGENCIA

2014

PÁGINA

2 de 2

De conformidad con lo establecido en el artículo 30 de la Ley 23 de 1982 y el artículo 11 de la Decisión Andina 351 de 1993, “Los derechos morales sobre el trabajo son propiedad de los autores” , los cuales son irrenunciables, imprescriptibles, inembargables e inalienables.

EL AUTOR/ESTUDIANTE: Juan David Lara Barrero. C.C 1.110.602.891

Firma: _____



TÍTULO COMPLETO DEL TRABAJO: Teoría Cuántica del Péndulo Aplicada al Etano y Hexacloroplatinato de Potasio.

AUTOR O AUTORES:

Primero y Segundo Apellido	Primero y Segundo Nombre
Lara Barrero	Juan David

DIRECTOR Y CODIRECTOR TESIS:

Primero y Segundo Apellido	Primero y Segundo Nombre
Rasero Causil	Diego Alejandro

ASESOR (ES):

Primero y Segundo Apellido	Primero y Segundo Nombre
----------------------------	--------------------------

PARA OPTAR AL TÍTULO DE: Físico

FACULTAD: Ciencias Exactas y Naturales

PROGRAMA O POSGRADO: Física.

CIUDAD: Neiva **AÑO DE PRESENTACIÓN:** 2022 **NÚMERO DE PÁGINAS:** 36 pág.

TIPO DE ILUSTRACIONES (Marcar con una X):

Diagramas___ Fotografías___ Grabaciones en discos___ Ilustraciones en general Grabados___
Láminas___ Litografías___ Mapas___ Música impresa___ Planos___ Retratos___ Sin ilustraciones___ Tablas
o Cuadros

Vigilada Mineducación

La versión vigente y controlada de este documento, solo podrá ser consultada a través del sitio web Institucional www.usco.edu.co, link Sistema Gestión de Calidad. La copia o impresión diferente a la publicada, será considerada como documento no controlado y su uso indebido no es de responsabilidad de la Universidad Surcolombiana.



SOFTWARE requerido y/o especializado para la lectura del documento: Adobe Acrobat Reader o cualquier otro lector de PDF.

MATERIAL ANEXO:

PREMIO O DISTINCIÓN (*En caso de ser LAUREADAS o Meritoria*):

PALABRAS CLAVES EN ESPAÑOL E INGLÉS:

<u>Español</u>		<u>Inglés</u>		<u>Español</u>		<u>Inglés</u>
1. Cuántica	-	Quantum		6. Mathieu	-	Mathieu
2. Péndulo	-	Pendulum		7. niveles de energía	-	energy levels
3. Etano	-	Ethane		8. valores propios	-	eigenvalues
4. Schrödinger	-	Schrödinger				
5. Hexacloroplatinato de Potasio	-	Potassium Hexachloroplatinate				

RESUMEN DEL CONTENIDO: (Máximo 250 palabras)

En el presente trabajo de grado se resolvió analíticamente la solución general de la ecuación de Schrödinger para un Péndulo Cuántico, el cual está sujeto a una fuerza restauradora molecular, y una fuerza restauradora gravitacional, en donde se realizó primero una descripción clásica del problema y luego se hizo una descripción cuántica, para así deducir la ecuación a solucionar, abarcando temas de estudio como la ecuación de Mathieu y sus respectivas soluciones (Funciones de Mathieu), mostrando algunas de las mismas. Además, se utilizó algunos softwares numéricos comerciales como Fortran (Visual Studio 2022) y Wolfram Mathematica 12 para llegar a cabo la programación y así encontrar una solución numérica y aplicar esta teoría a dos sistemas moleculares, como lo son el Etano, y el Hexacloroplatinato de Potasio. Se determinaron los valores propios y niveles de energía para cada caso y así expresarlos mediante una tabla de resultados.

Por esta razón, en este trabajo de grado se pretendió dar respuesta a la siguiente pregunta de investigación:

¿COMO DESCRIBIR UN PÉNDULO DESDE EL PUNTO DE VISTA DE LA MECÁNICA CUÁNTICA?



ABSTRACT: (Máximo 250 palabras)

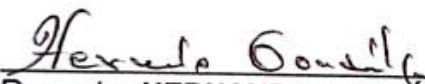
In the present degree work, the general solution of the Schrödinger equation for a Quantum Pendulum was analytically solved, which is subject to a molecular restoring force, and a gravitational restoring force, where a classic description of the problem was first made and then a quantum description was made, in order to deduce the equation to be solved, covering study topics such as the Mathieu equation and its respective solutions (Mathieu functions), showing some of them. In addition, some commercial numerical software such as Fortran (Visual Studio 2022) and Wolfram Mathematica 12 were used to carry out the programming and thus find a numerical solution and apply this theory to two molecular systems, such as Ethane and Hexachloroplatinate of Potassium. The eigenvalues and energy levels for each case were determined and expressed in a table of results.

For this reason, in this degree work it was intended to answer the following research question:

HOW TO DESCRIBE A PENDULUM FROM THE POINT OF VIEW OF QUANTUM MECHANICS?

APROBACION DE LA TESIS

Nombre Jurado: Hernando González Sierra

Firma: 
Docente **HERNANDO GONZÁLEZ SIERRA**
Jurado . . .

Nombre Jurado: Gerardo Rivera Barrera

Firma: 
Docente **GERARDO RIVERA BARRERA**
Jurado

UNIVERSIDAD SURCOLOMBIANA
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
PROGRAMA DE FÍSICA



**TEORÍA CUÁNTICA DEL PÉNDULO APLICADA AL ETANO
Y HEXACLOROPLATINATO DE POTASIO.**

Trabajo de Grado para optar al título de Físico

Desarrollado por: Juan David Lara Barrero

Código: 20171155538

Firma: Juan Lara

Director: Diego Rasero Causil

Firma: Diego A. Rasero C.

Area: Física Cuántica

Neiva-Huila
Octubre del 2022

Esta tesis esta dedicada a mis padres: Ramiro Lara y Norma Barrero.

Agradecimientos

Quiero dar gracias primeramente a mi señor Jesús por permitir cumplir mi objetivo de ser un profesional y lograr este anhelado título, todo se lo debo a Él.

Quiero agradecer de manera especial a mis padres Ramiro Lara y Norma Barrero, y a mi hermana Alexandra Lara, por su apoyo incondicional en mi formación profesional, al iniciar y culminar mi proyecto académico. A mi tía Maria Eugenia Barrero por ayudarme cuando inicie con mis estudios. A mi asesor de trabajo de grado, el profesor Diego Rasero, por su enseñanza y colaboración, al permitirme abordar el estudio de la Mecánica Cuántica. Agradezco también a cada uno de mis profesores y compañeros que hicieron parte en mi formación profesional como físico, a mis compañeros Luis Eduardo Cardoso y Oscar Vasquez por haberme asesorado en algunos aspectos en la realización de este trabajo de grado. Quiero agradecer de manera especial a mi compañero Jorge Eduardo Ortiz Cerquera, quien prestó su asesoramiento profesional para realizar de manera consisa la programación que llevé a cabo para este trabajo de grado. Por último a la Universidad Surcolombiana por prestar sus espacios donde pude desarrollar las diferentes actividades académicas correspondientes al programa de física.

Resumen

En el presente trabajo de grado se resolvió analíticamente la ecuación de Schrödinger para un Péndulo Cuántico. Esta solución se utilizó para determinar los valores de energía con la ayuda de algunas ecuaciones que se dedujeron analíticamente, y de esta misma manera aplicar dicha teoría al Etano (C_2H_2) y al Hexacloroplatinato de Potasio (K_2PtCl_6). Los resultados indican que el péndulo lo podemos estudiar o analizar desde dos perspectivas opuesta: como un oscilador armónico cuántico y como un rotor rígido, en donde se llevó a cabo la respectiva interpretación de cada sistema.

Abstract

In the present degree work, the Schrodinger equation for a Quantum Pendulum was analytically solved. This solution was used to determine the energy values with the help of some equations that were derived analytically, and in the same way apply this theory to Ethane (C_2H_2) and Potassium Hexachloroplatinate (K_2PtCl_6). The results indicate that we can study or analyze the pendulum from two opposite perspectives: as a quantum harmonic oscillator and as a rigid rotor, where their respective interpretation of each system was carried out.

Índice

1. Nociones Básicas	11
1.1. La Ecuación de Schrödinger.	12
1.1.1. Ecuación dependiente del tiempo.	12
1.1.2. Ecuación independiente del tiempo.	12
2. Métodos Teóricos de Solución	14
2.1. Descripción Clásica del Péndulo.	14
2.2. Descripción Cuántica del Péndulo.	16
2.3. Ecuación de Mathieu	17
2.4. Funciones de Mathieu	19
2.4.1. Propiedades de las Funciones de Mathieu	21
2.4.2. Propiedades Generales	21
3. Estructuras Moleculares.	23
3.1. Etano.	23
3.2. Hexacloroplatinato de Potasio	25
4. Resultados y Análisis	27
4.1. Conclusiones	29
5. Referencias	36

Índice de figuras

1. Diagrama de cuerpo libre del péndulo.	14
2. Medición de h , l y γ	15
3. Estructura molecular del Etano [3].	23
4. Estructura del Etano no alineado [3].	23
5. Estructura del Hexacloroplatinato de Potasio. [3]	25
6. Valores Propios a_i	34
7. Valores Propios b_i	35

“La ciencia no es más que un refinamiento del pensamiento cotidiano.”
Albert Einstein (1879-1955).

“Porque por la fe entendemos haber sido constituido el universo por la palabra de Dios, de modo que lo que se ve fue hecho de lo que no se veía.”
Hebreos 11:3

“Nada es mejor que leer y lograr más y más conocimiento”.
Stephen Hawking (1942-2018)

Introducción

El péndulo clásico tiene una larga y rica historia en física que comienza con la observación de Galileo del isocronismo del período y continuando el interés actual en el estudio de la sincronización de péndulos caóticos. Por otro lado, la historia del péndulo cuántico se remonta hasta la aparición de un artículo hace más de 70 años sobre el péndulo cuántico en *Physical Review* escrito por uno de los pioneros de la física atómica, Edward Condon en 1928. El artículo de Condon planteó el problema básico y los medios para su solución [1]. En este trabajo de grado describimos las características del péndulo cuando se analiza según las reglas de la física cuántica.

Gran parte del trabajo sobre este último sistema se ha centrado en cálculos exactos, aproximaciones semiclásicas y perturbativas de los estados propios de energía y autovalores. Esto ha demostrado que el problema del péndulo cuántico es matemáticamente difícil y, a diferencia del sistema masa-resorte (considerado como el prototipo de oscilador armónico cuántico), no es un claro ejemplo pedagógico. Además, el oscilador armónico, visto como un sistema masa-resorte, es un modelo muy aplicado, en parte porque su potencial corresponde al primer término en la expansión en serie de potencias del potencial de un campo de fuerza de buen comportamiento. Por el contrario, el potencial del péndulo es mucho más específico con la consiguiente escasez de aplicaciones realistas. A pesar de estas dificultades, se han encontrado algunos ejemplos interesantes de movimiento pendular microscópico [2].

El péndulo cuántico es fundamental para comprender las rotaciones internas obstaculizadas en química, las características cuánticas de los átomos dispersos, así como muchos otros fenómenos cuánticos. Aunque un péndulo no sujeto a la aproximación de ángulo pequeño tiene una no linealidad inherente, la ecuación de Schrödinger para el sistema cuantizado se puede resolver tanto analíticamente como numéricamente.

Por esta razón, en este trabajo de grado se pretende dar respuesta a la siguiente pregunta: **¿CÓMO DESCRIBIR UN PÉNDULO DESDE EL PUNTO DE VISTA DE LA MECÁNICA CUÁNTICA?**

El trabajo de grado está estructurado de la siguiente manera: en el Capítulo I se establecen los conceptos básicos para abarcar este estudio del péndulo visto por la mecánica cuántica. En el Capítulo II se hace una descripción clásica del péndulo. Posteriormente se realiza la descripción cuántica del péndulo, encontrando la ecuación de Schrödinger que debemos resolver.

Una sección del Capítulo II, abarca lo relacionado con la **Ecuación de Mathieu**, que es el eje fundamental para la solución analítica del péndulo cuántico. En el Capítulo III hablaremos de los dos sistemas moleculares (C_2H_2 y K_2PtCl_6) que vamos a utilizar para aplicar esta teoría cuántica del péndulo. Finalmente en el Capítulo IV se presentan los resultados obtenidos de la programación y sus respectivos análisis.

Objetivos

Objetivo General

- Resolver analíticamente la ecuación de Schrödinger para el péndulo cuántico.

Objetivos Especificos

- Encontrar los valores de energía del péndulo cuántico.
- Aplicar el modelo del péndulo cuántico al Etano y Hexacloroplatinato de Potasio.
- Encontrar los valores propios, y las funciones de onda del péndulo cuántico.

Capítulo I

1. Nociones Básicas

Las tres primeras décadas del siglo XX fueron testigos del nacimiento de las teorías especial y general de la relatividad de Einstein, así como la revolución aún más amplia abarcada por las diversas realizaciones de la física cuántica. Profundizando cada vez más en la naturaleza a finales del siglo XIX y la experimentación de laboratorio de principios del siglo XX cada vez más se produjo fenómenos para los cuales la física clásica no proporcionó explicación. Algunos de los acertijos más difíciles incluyeron el efecto fotoeléctrico, la distribución de luz ultravioleta no física predicha por la física clásica para el espectro electromagnético de un objeto calentado, varios experimentos donde los electrones y otros objetos pequeños se comportaron como ondas en lugar de partículas, la estructura discreta de absorción y emisión de espectros en radiación atómica, y así sucesivamente. El desarrollo de una nueva teoría fue gradual y abarcó el primer cuarto del siglo XX, que culminó en los años 1925-1926 con la publicación de la mecánica ondulatoria de Schrödinger (1887-1961) y la mecánica matricial de Born (1882-1970), Heisenberg (1901-1976) y Jordán (1902-1980) [3].

La mecánica cuántica es una teoría verdaderamente científica en el sentido de que predice y se ocupa de las observaciones, pero no intenta describir la realidad subyacente en términos de nociones primitivas o construcciones metafísicas. De hecho, la filosofía del positivismo lógico tuvo una influencia tangible en el desarrollo temprano de la interpretación de la mecánica cuántica. No obstante, para el físico en activo, la mecánica cuántica tiene un enorme éxito y, en las últimas ocho décadas, no se han encontrado alternativas exitosas para reemplazarla. Predice los eventos del microcosmos con una precisión asombrosa. Así es que cuando entramos en el mundo molecular, atómico y dimensiones nucleares, debemos abandonar la mecánica clásica y usar la metodología de la mecánica cuántica. En 1923 De Broglie propuso generalizar esta dualidad (onda-partícula) a todas las partículas conocidas. Propuso la hipótesis, paradójica en su momento, de que a toda partícula clásica microscópica se le puede asignar una onda, lo cual se comprobó experimentalmente en 1927 cuando se observó la difracción de electrones [4]. Por analogía con los fotones, De Broglie asocia a cada partícula libre con energía E y cantidad de movimiento p una frecuencia ν y una longitud de onda λ de manera que:

$$E = h\nu \quad ; \quad p = \frac{h}{\lambda} \quad (1)$$

La comprobación experimental hecha por Davisson y Germer mostró que la longitud de onda asociada a los electrones medida en la difracción según la fórmula de Bragg se correspondía con la longitud de onda predicha por la fórmula de De Broglie [5]. Esa predicción llevó a Schrödinger a tratar de escribir una ecuación para la onda asociada de De Broglie que para escalas macroscópicas se redujera a la ecuación de la mecánica clásica de la partícula.

1.1. La Ecuación de Schrödinger.

Esta ecuación fue desarrollada por el físico austriaco Erwin Schrödinger hacia el año 1925. Describe la evolución temporal de una partícula subatómica masiva de naturaleza ondulatoria y no relativista. La ecuación de Schrödinger es de suma importancia en la teoría de la mecánica cuántica donde representa, para las partículas microscópicas, un papel análogo a la segunda ley de Newton en la mecánica clásica. Las partículas microscópicas incluyen a las partículas elementales, tales como electrones, así como sistemas de partículas como lo son los núcleos atómicos [5].

1.1.1. Ecuación dependiente del tiempo.

La forma de la ecuación de Schrödinger depende de la situación física. La forma más general es la ecuación dependiente del tiempo, la cual describe un sistema que evoluciona con el paso del tiempo:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,t) = \hat{H}\Psi(r,t) \quad (2)$$

Donde i es la unidad imaginaria, \hbar es la constante de Planck reducida o constante de Dirac. Ψ es la función de onda del sistema cuántico (más precisamente, en este contexto, se la denomina “función de onda posición-espacio”), y \hat{H} es el operador diferencial Hamiltoniano.

Cuando se reemplaza \hat{H} :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,t) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r,t) \right] \Psi(r,t) \quad (3)$$

Donde m es la masa de la partícula, V es su energía potencial, ∇^2 es el Laplaciano (un operador diferencial), y Ψ es la función de onda. Según los operadores diferenciales que se utilizan, se observa que es una ecuación diferencial lineal en derivadas parciales.

1.1.2. Ecuación independiente del tiempo.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo predice que las funciones de onda pueden tener la forma de ondas estacionarias, denominados estados estacionarios. Estos estados son importantes, y si los estados estacionarios se clasifican y se pueden comprender, entonces es más fácil de resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es la ecuación que describe los estados estacionarios [4]. Solo se utiliza cuando el Hamiltoniano no es dependiente del tiempo. Sin embargo, la función de onda total seguirá dependiente del tiempo.

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V \right] \varphi = E\varphi \quad (4)$$

Es decir, la ecuación dice que cuando el operador Hamiltoniano actúa sobre cierta función de onda φ , y el resultado es proporcional a la misma función de onda φ , entonces φ es un estado estacionario, y la constante de proporcionalidad, E es la energía del estado φ . La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, en terminología de álgebra lineal, es una ecuación de autovalores.

A principios de la década de 1930, Born que había trabajado junto con Heisenberg y Jordan en una versión de la mecánica cuántica basada en el formalismo matricial alternativo a la de Heisenberg, notó que la ecuación de Schrödinger compleja tiene una integral de movimiento dada por $\psi\psi^* = |\psi|^2$ que podía ser interpretada como una densidad de probabilidad. Born le dio a la función de onda una interpretación probabilística diferente de la que De Broglie y Schrödinger le habían dado, y por ese trabajo recibió el premio Nobel en 1954. Born ya había notado, en su trabajo mediante el formalismo matricial de la mecánica cuántica, que el conjunto de estados cuánticos llevaba de manera natural a construir espacios de Hilbert para representar los estados físicos de un sistema cuántico. [5]

De ese modo se abandonó el enfoque de la función de onda como una onda material, y pasó a interpretarse de modo más abstracto como una amplitud de probabilidad. En la mecánica cuántica moderna, el conjunto de todos los estados posibles en un sistema se describe por un espacio de Hilbert complejo y separable, y cualquier estado instantáneo de un sistema se describe por un vector unitario en ese espacio (o más bien una clase de equivalencia de vectores unitarios). Este vector unitario codifica las probabilidades de los resultados de todas las posibles medidas hechas al sistema. Como el estado del sistema generalmente cambia con el tiempo, el vector estado es una función del tiempo.

Capítulo II

2. Métodos Teóricos de Solución

2.1. Descripción Clásica del Péndulo.

El péndulo simple es una idealización de un péndulo real. Consiste en una masa puntual, m , unida a una varilla rígida infinitamente ligera de longitud l que es unida a un punto de pivote sin fricción. Si se desplaza de su posición de equilibrio vertical, este péndulo idealizado oscilará con una amplitud constante.

La Figura 1 muestra el diagrama de cuerpo libre del péndulo:

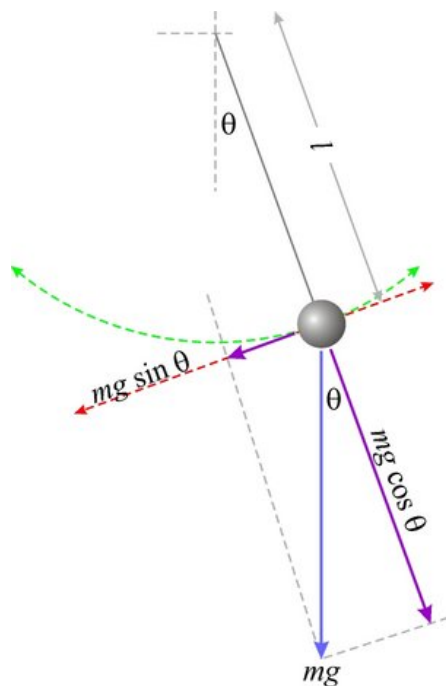


Figura 1: Diagrama de cuerpo libre del péndulo.

[http://www.juntadeandalucia.es/averroes/centros-tic/14700420/helvia/aula/archivos /repositorio/0/22/html/medidadeltiempo/para_saber_ms.html](http://www.juntadeandalucia.es/averroes/centros-tic/14700420/helvia/aula/archivos/repositorio/0/22/html/medidadeltiempo/para_saber_ms.html)

En cada instante, el movimiento se realiza en el eje x , así que usando la segunda ley de Newton:

$$\sum F_x = ma_x \quad (5)$$

$$-mgsin(\theta) = m \frac{d^2x}{dt^2} \quad (6)$$

Donde $-mgsin(\theta)$ es una fuerza restauradora gravitacional, y θ el desplazamiento angular del péndulo con respecto a la vertical. Ahora bien la energía mecánica total del sistema viene dada por el Hamiltoniano.

$$H = E_c + V = \frac{1}{2}mv^2 + V \quad (7)$$

La energía cinética escrita en coordenadas polares será:

$$E_c = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}ml^2 \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 \quad (8)$$

Para hallar la energía potencial usamos la siguiente figura:

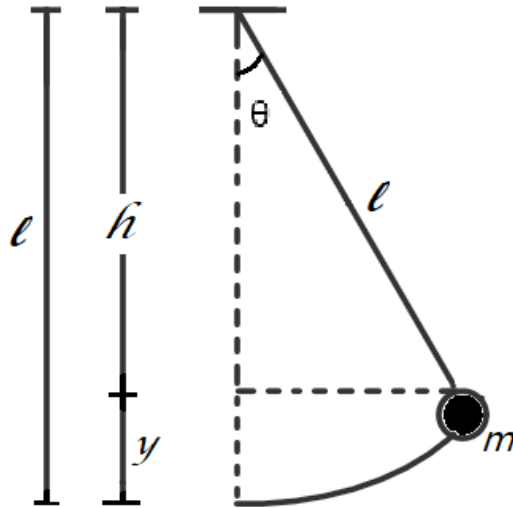


Figura 2: Medición de h , l y y

A partir de la cual:

$$y = l(1 - \cos(\theta)) \quad (9)$$

Como la energía potencial gravitacional viene dada como $V = mgy$ entonces teniendo en cuenta la Ec. (9):

$$V = mgl(1 - \cos(\theta)) = V(\theta) \quad (10)$$

Con la energía potencial encontrada, expresada en la anterior ecuación [6], tenemos que la energía mecánica total del sistema será :

$$H = \frac{1}{2}ml^2 \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 + mgl(1 - \cos(\theta)) \quad (11)$$

2.2. Descripción Cuántica del Péndulo.

A partir de la descripción clásica del péndulo, podemos pasar a un contexto cuántico. Primero vamos a expresar la *energía cinética* en términos del *momento*. Teniendo en cuenta lo anterior, el operador Hamiltoniano viene dado como:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + mgl(\hat{1} - \cos(\hat{\theta})) \quad (12)$$

En representación de coordenadas, los operadores quedan transformados de la siguiente manera:

$$\hat{\theta} \rightarrow \theta \quad (13)$$

$$\hat{p} \rightarrow -i\hbar\nabla = -i\hbar \left(\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \quad (14)$$

$$\hat{p}^2 \rightarrow -\hbar^2\nabla^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) \quad (15)$$

Pero debemos recordar que en nuestro caso $r = l = cte$, entonces:

$$\hat{p}^2 \rightarrow -\hbar^2 \left(\frac{1}{l^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) \quad (16)$$

Así que la Ec. (12) toma la siguiente forma:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2ml^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + mgl(1 - \cos \theta) \quad (17)$$

Para abreviar hacemos $mgl = V_0$. Entonces, que nuestra ecuación queda expresada como:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2ml^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + V_0(1 - \cos \theta) \quad (18)$$

Con lo cual la ecuación estacionaria de Schrödinger toma la forma:

$$H\psi(\theta) = E\psi(\theta) \quad (19)$$

Sustituimos la Ec. (18) en la Ec. (19):

$$-\frac{\hbar^2}{2ml^2} \frac{d^2\psi}{d\theta^2} + V_0(1 - \cos(\theta))\psi = E\psi \quad (20)$$

También puede expresarse como:

$$-\frac{\hbar^2}{2ml^2} \frac{d^2\psi}{d\theta^2} + mgl(1 - \cos(\theta))\psi = E\psi \quad (21)$$

Una vez resuelta, nuestra versión de la ecuación de Schrödinger nos dará tanto los **niveles de energía** del péndulo como la probabilidad de ubicación en cualquier pequeña región del espacio.

2.3. Ecuación de Mathieu

Para solucionar la Ec. (20), se definen las **energías dimensionales** U_0 y ε , 10 normalizadas por el factor $\hbar^2/2ml^2$.

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2ml^2} \quad (22)$$

$$U_0 = \frac{mgl}{E_0} \quad (23)$$

$$\varepsilon = \frac{E}{E_0} \quad (24)$$

Al remplazar (22), (23), (24) en (21) tenemos:

$$-\frac{d^2\psi}{d\theta^2} + U_0(1 - \cos \theta)\psi = \varepsilon\psi \quad (25)$$

Ahora consideramos θ como un ángulo pequeño, por lo que vamos hacer uso de las series de potencia de Taylor que se muestra a continuación:

$$\cos(x) = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \dots \quad (26)$$

Luego las utilizamos en nuestro problema y describimos el $\cos(\theta)$ de la siguiente manera:

$$\cos(\theta) = 1 - \frac{\theta^2}{2!} + \frac{\theta^4}{4!} - \frac{\theta^6}{6!} + \dots \quad (27)$$

Pero como consideramos θ como un ángulo pequeño:

$$\frac{\theta^4}{4!} \rightarrow 0 \quad ; \quad \frac{\theta^6}{6!} \rightarrow 0$$

Entonces:

$$\cos(\theta) = 1 - \frac{\theta^2}{2!} = 1 - \frac{\theta^2}{2} \quad (28)$$

$$\frac{\theta^2}{2} = 1 - \cos \theta \quad (29)$$

Así que tomamos (29) y la sustituimos en (25) y tenemos:

$$- \frac{d^2\psi}{d\theta^2} + U_0 \frac{\theta^2}{2} \psi = \varepsilon \psi \quad (30)$$

Después de esto, realizamos el cambio de variable $q = 2U_0 \rightarrow U_0 = \frac{q}{2}$ y $\theta = 2x$, tenemos:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} [(-2q + 4\varepsilon)\psi + 2q\cos(2x)\psi] = 0 \quad (31)$$

Ahora, definiendo:

$$a = -2q + 4\varepsilon \quad \Rightarrow \quad a = 4(\varepsilon - U_0) \quad (32)$$

llegamos a la **Ecuación de Mathieu**:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + [a - 2q\cos(2x)]\psi = 0 \quad (33)$$

A partir de (32) se obtiene:

$$\varepsilon = \frac{a}{4} + U_0 \quad (34)$$

Donde a es **un valor propio** de la ecuación. El parámetro q es fijo y depende únicamente del potencial adimensional, U_0 . El parámetro a depende tanto de U_0 como de ε . Sin embargo, como muchas ecuaciones diferenciales en física, existen soluciones físicamente realizables para ciertos valores de ε y, en consecuencia, a . La ecuación de Mathieu es, como la ecuación de Schrödinger, un problema de valores propios.

Hay que aclarar que la Ec. (34) es, por supuesto, la ecuación para el oscilador armónico cuántico cuyos **valores propios de energía** forman la bien conocida secuencia, $1/2U_0$, $3/2U_0$, $5/2U_0$. Con fines ilustrativos, elegimos $U_0 = 2$ para que las energías del oscilador armónico sean simplemente 1,3,5.

Hay dos casos: **(a)** cuando la energía del péndulo es mucho menor que la altura de la barrera, y **(b)** cuando la energía del péndulo es mucho mayor que la altura de la barrera. Clásicamente, el caso **(a)** corresponden a el péndulo que oscila con una amplitud angular muy pequeña, y **(b)** el péndulo que gira rápidamente y casi libremente, de modo que se ralentiza solo un poco al pasar por encima de su movimiento. El Caso (a), en el límite de pequeña oscilación se convierte en el **péndulo linealizado** u **oscilador armónico**. El caso (b), en el límite de energía, se convierte en un **rotor libre**.

2.4. Funciones de Mathieu

Nuestra ecuación de Schrödinger para el péndulo toma la forma de una ecuación de Mathieu como lo vemos en Ec. (33). Las soluciones para la ecuación de Mathieu son las **Funciones de Mathieu**, que en últimas serán las **Funciones de onda** para el sistema. A modo ilustrativo, vamos a mencionar las funciones de Mathieu de primer tipo y segundo tipo para tenerlas presente.

Las funciones de Mathieu del primer tipo se pueden representar como series de Fourier:

$$ce_{2n}(x, q) = \sum_{r=0}^{\infty} A_{2r}^{(2n)}(q) \cos(2rx) \quad (35)$$

$$ce_{2n+1}(x, q) = \sum_{r=0}^{\infty} A_{2r+1}^{(2n+1)}(q) \cos[(2r+1)x] \quad (36)$$

$$se_{2n+1}(x, q) = \sum_{r=0}^{\infty} B_{2r+1}^{(2n+1)}(q) \cos[(2r+1)x] \quad (37)$$

$$se_{2n+2}(x, q) = \sum_{r=0}^{\infty} B_{2r+2}^{(2n+2)}(q) \cos[(2r+2)x] \quad (38)$$

Los coeficientes de expansión $A_j^{(i)}(q)$ Y $B_j^{(i)}(q)$ son funciones de q pero independiente de x [7].

Hay varias maneras de representar las funciones de Mathieu de segundo tipo. Una representación es en términos de funciones de Bessel.

$$fe_{2n}(x, q) = -\frac{\pi\gamma_n}{2} \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^{r+n} A_{2r}^{(2n)}(-q) \operatorname{Im} [J_r(\sqrt{q}e^{ix}) Y_r(\sqrt{q}e^{-ix})] \quad (39)$$

Donde:

$$\gamma_n = \begin{cases} \sqrt{2}, & n=0 \\ 2n, & n \geq 1 \end{cases}$$

$$\begin{aligned} fe_{2n+1}(x, q) = \frac{\pi\sqrt{q}}{2} \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^{r+n} A_{2r+1}^{(2n+1)}(-q) \operatorname{Im} [J_r(\sqrt{q}e^{ix}) Y_{r+1}(\sqrt{q}e^{-ix}) + \dots \\ \dots J_{r+1}(\sqrt{q}e^{ix}) Y_r(\sqrt{q}e^{-ix})] \end{aligned} \quad (40)$$

$$\begin{aligned} ge_{2n+1}(x, q) = -\frac{\pi\sqrt{q}}{2} \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^{r+n} B_{2r+1}^{(2n+1)}(-q) \operatorname{Re} [J_r(\sqrt{q}e^{ix}) Y_{r+1}(\sqrt{q}e^{-ix}) - \dots \\ \dots J_{r+1}(\sqrt{q}e^{ix}) Y_r(\sqrt{q}e^{-ix})] \end{aligned} \quad (41)$$

$$\begin{aligned} ge_{2n+2}(x, q) = -\frac{\pi q}{4(n+1)} \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^{r+n} B_{2r+2}^{(2n+2)}(-q) \operatorname{Re} [J_r(\sqrt{q}e^{ix}) Y_{r+2}(\sqrt{q}e^{-ix}) - \dots \\ \dots J_{r+2}(\sqrt{q}e^{ix}) Y_r(\sqrt{q}e^{-ix})] \end{aligned} \quad (42)$$

Dónde $n, q > 0$ y $J_r(x)$ $Y_r(x)$ son funciones de Bessel de primer y segundo tipo [\[7\]](#) [\[8\]](#).

2.4.1. Propiedades de las Funciones de Mathieu

El comportamiento de las funciones de Mathieu es complicado, ya que x y q dependen de todas las eigenfunciones. La variable q es un parámetro que necesitamos para obtener el comportamiento de ambos eigenvalores y ambas eigenfunciones como una función en q [9].

En el caso especial $q = 0$ existen soluciones periódicas solo si $a = n^2$, $n = 0, 1, 2, \dots$ y estas soluciones son:

$$\begin{aligned} &1, \quad \cos x, \quad \cos 2x \quad (\text{Soluciones Pares.}) \\ &\sin x, \quad \sin 2x \quad (\text{Soluciones Impares.}) \end{aligned}$$

Las funciones de Mathieu correspondientes a valores de q , cuando $q \rightarrow 0$ se denotan de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} &ce_0(x, q), \quad ce_1(x, q), \quad ce_2(x, q), \quad (\text{soluciones pares}) \\ &se_1(x, q), \quad se_2(x, q), \quad (\text{soluciones impares}) \end{aligned}$$

Si $q = 0$ cada una de estas eigenfunciones tiene un eigenvalor distinto. Para cada eigenvalor existe a lo más una solución de período π o 2π , y cada par $(ce_n(x, q), se_n(x, q))$ tiene n ceros en el intervalo $\pi < x \leq 2\pi$. Estas soluciones pueden ser únicas de varias maneras. Por ejemplo, una de estas maneras es eligiendo el coeficiente de $\cos(nt)$ en $ce_n(x, q)$ y el coeficiente de $\sin(nt)$ en $se_n(t, q)$ iguales a uno, el otro camino es fijar la constante de normalización h_n [9].

El eigenvalor asociado con las soluciones pares, $ce_n(x, q)$, se denotan por $a_n(q)$, $n = 0, 1, 2, \dots$, y el eigenvalor asociado con las soluciones impares, $se_n(t, q)$, como $b_n(q)$, $n = 0, 1, 2, \dots$. La paridad y el período de estas funciones es resumida en la siguiente tabla:

Tabla 1: Paridad y Eigenvalores de las funciones.

Función	Periodo	Paridad ($x = 0$)	Paridad ($x = \pi/2$)	Eigenvalores	
$ce_{2n}(x, q)$	π	Par	Par	$a_{2n}(q)$	$n=0,1,\dots$
$ce_{2n+1}(x, q)$	2π	Par	Impar	$a_{2n+1}(q)$	$n=0,1,\dots$
$se_{2n}(x, q)$	π	Impar	Impar	$b_{2n}(q)$	$n=1,2,\dots$
$se_{2n-1}(x, q)$	2π	Impar	Par	$b_{2n-1}(q)$	$n=1,2,\dots$

2.4.2. Propiedades Generales

1- La ecuación de Mathieu es un sistema de Sturm-Liouville.

$$\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{dy}{dx} \right) + (q(x) + \lambda w(x))y = 0 \quad (43)$$

con $p(z) = 1$, $q(x) = -2q \cos 2x$, $w(x) = 1$, $\lambda = a$ y con condiciones a la frontera periódicas [7] [9].

2- Considerando el espacio L^2 , el conjunto de eigenfunciones $\{ce_r(x, q)\}$, $\{se_r(x, q)\}$ es completo en el intervalo $-\pi < t < \pi$. Adicionalmente, cada uno de los conjuntos $\{ce_r(x, q)\}$ y $\{se_r(x, q)\}$ es completo en $0 < x \leq \pi$ y cada uno de los conjuntos $\{ce_{2r}(x, q)\}$, $\{ce_{2r+1}(x, q)\}$, $\{se_{2r}(x, q)\}$ y $\{se_{2r+1}(x, q)\}$ es completo en el intervalo $0 < t \leq \pi/2$.

3- Las funciones de Mathieu son ortogonales [8]:

$$\int_{-\pi}^{\pi} ce_m(x, q)ce_n(x, q)dx = h_n\delta_{nm} \quad (44)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} se_m(x, q)se_n(x, q)dx = h_n\delta_{nm} \quad (45)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} ce_m(x, q)se_n(x, q)dx = 0 \quad (46)$$

Nosotros utilizamos la convención de que la constante de normalización $h_k = \pi$.

4- Los eigenvalores son ordenados de la siguiente manera:

$$a_0(q) < b_1(q) < a_1(q) < b_2(q) < a_2(q) < (q \neq 0)$$

5- Es conveniente dividir los eigenvalores en tres tipos: existen eigenvalores con valores mucho menores que $2q$, eigenvalores cuyos valores son mucho más grandes que $2q$ y eigenvalores que están alrededor de $2q$ [9].

Capítulo III

3. Estructuras Moleculares.

3.1. Etano.

El Etano es un hidrocarburo alifático alcano con dos átomos de carbono, de fórmula C_2H_6 . En condiciones normales es gaseoso y un excelente combustible. Su punto de ebullición está en $-88\text{ }^\circ C$. Se encuentra en cantidad apreciable en el gas natural [3].

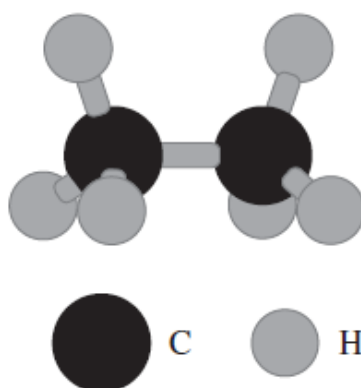


Figura 3: Estructura molecular del Etano [3].

En la Figura 3, la estructura se muestra en forma alineada o “eclipsada”, donde los átomos de hidrógeno coinciden entre sí en pares enfrentados, mientras que la estructura de la Figura 4 muestra átomos de hidrógeno opuestos no alineados o “escalonados”.

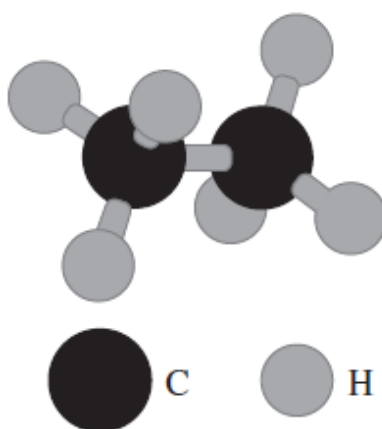


Figura 4: Estructura del Etano no alineado [3].

La estructura eclipsada requiere alrededor de 2.9 kcal/mol ($9.73 \times 10^{-21}\text{ J/molecula}$) en comparación con la conformación “escalonada”. Esta interacción se debe a la ligera repulsión

adicional de las nubes de electrones de los enlaces carbono-hidrógeno a medida que pasan más cerca en la conformación eclipsada [2]. La función potencial tiene en cuenta el hecho de que hay tres posiciones idénticas de mínima energía y se expresa como:

$$V = V_0(1 - \cos 3\theta) \quad (47)$$

Una expresión que es muy similar al péndulo cuántico. El ángulo θ , entre la orientación de los dos complejos CH_3 , es cero cuando la molécula está en la formación escalonada. La conversión adecuada a nuestras unidades adimensionales habituales requiere que:

$$U_0 = \frac{V_0 I}{\hbar^2} \quad ; \quad \varepsilon = \frac{E I}{\hbar^2} \quad (48)$$

Donde I es el momento de inercia debido a tres átomos de hidrógeno con una longitud de enlace H-C de 1.11 Å. El enlace H-C forma un ángulo de 111° con el enlace C-C, con el momento de inercia resultante, $I = 5.39 \times 10^{-47} \text{kgm}^2$ [2].

Entonces, según (48), el valor U_0 es:

$$U_0 = \frac{(9,72 \times 10^{-21} \text{J/molecula})(5,39 \times 10^{-47} \text{kgm}^2)}{(1,054571817 \times 10^{-34} \text{Js})^2} \approx 47,25 \quad (49)$$

La ecuación adimensional de Schrödinger es ahora:

$$-\frac{d^2\psi}{d\theta^2} + U_0(1 - \cos 3\theta)\psi = \varepsilon\psi \quad (50)$$

La correspondiente Ecuación de Mathieu se obtiene considerando:

$$a = \frac{9}{4}(\varepsilon - U_0) \quad ; \quad q = \frac{2}{9}U_0 \quad (51)$$

De la anterior expresión, podemos despejar la energía ε y queda una expresión de la siguiente forma:

$$\varepsilon = \frac{9a}{4} + U_0 \quad (52)$$

En el límite de ángulos pequeños:

$$\varepsilon = 3\sqrt{\frac{U_0}{2}}(2n + 1) \quad (53)$$

La anterior ecuación representa los valores de los niveles de energía explícitamente para el oscilador armónico cuántico.

3.2. Hexafluoroplatinato de Potasio

El Hexafluoroplatinato de Potasio es el compuesto inorgánico con la fórmula K_2PtCl_6 . Es un sólido amarillo que es un ejemplo de una sal de potasio comparativamente insoluble [3].

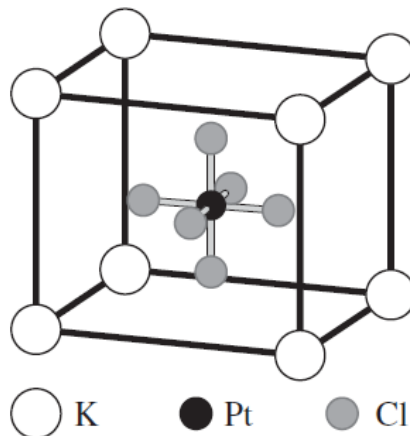


Figura 5: Estructura del Hexafluoroplatinato de Potasio. [3]

Analicemos ahora un “péndulo” microscópico que es predominantemente oscilatorio. Nuestro ejemplo es una red cristalina de moléculas de K_2PtCl_6 . El complejo $PtCl_6$ está situado en la celda cúbica circundante de iones K (Figura 5). El acoplamiento del complejo con los iones potasio es relativamente débil. Si pensamos en una constante de torsión o resorte, es bastante débil y el movimiento asociado con esta interacción es de frecuencia relativamente baja. Pero dentro del complejo $PtCl_6$ estrechamente conectado hay movimientos internos que representan interacciones más fuertes y, por lo tanto, tienen movimientos asociados que tienen una frecuencia relativamente alta. Sin embargo, nuestro interés está en la interacción débil del complejo como un todo con su entorno y su correspondiente movimiento. Estamos interesados en el movimiento de torsión de todo el complejo dentro de la celda cúbica y, de la Figura 5, observe que tiene una simetría cuádruple con respecto a cualquiera de sus tres ejes rectos Cl-Pt-Cl [2]. Por lo tanto, el potencial puede representarse como:

$$V = V_0(1 - \cos 4\theta) \quad (54)$$

A diferencia del Etano, no conocemos el valor de la altura de la barrera, $2V_0$. Como el complejo $PtCl_6$ ejecuta oscilaciones de amplitud relativamente pequeña, la ecuación de Schrödinger linealizada, se puede escribir como:

$$-\frac{d^2\psi}{d\theta^2} + U_0\frac{16\theta^2}{2}\psi = E\psi \quad (55)$$

Lo que conduce a una solución de oscilador armónico. Además, la altura de la barrera potencial se puede expresar simplemente en términos de la frecuencia del oscilador y el momento de inercia:

$$V_0 = I\omega_0^2/16 \quad (56)$$

Se sabe que el momento de inercia es $1.28 \times 10^{-44} kg m^2$. La frecuencia angular es menos directa. Se ha calculado, a partir de consideraciones fundamentales de los campos de fuerza electromagnética entre el complejo y los iones de potasio circundantes, en aproximadamente $1.89 \times 10^{12} Hz$. Por otro lado, un enfoque diferente, usando una técnica llamada *Resonancia Cuadrupolar Nuclear*, sugiere que el número de vibraciones por segundo es 1.75×10^{12} . Tomaremos $\omega = 2\pi \times 1.8 \times 10^{12} rad/s$. En comparación con el Etano, la frecuencia de oscilación del K_2PtCl_6 es menor por un factor de 3, mientras que el momento de inercia es mayor por un factor de casi 300. Por lo tanto, es mucho más difícil para el complejo de $PtCl_6$ superar su barrera de potencial y rotar 90° a una nueva posición de equilibrio alrededor de la cual pueda oscilar. Entonces esperamos que el complejo pase la mayor parte de su tiempo en estados de energía por debajo de la barrera potencial. El uso de software numérico es fundamental para calcular a_i y b_i [2]. Los valores de los parámetros físicos conducen a una gran altura de barrera, es decir:

$$U = U_0(1 - \cos 4\theta) \quad (57)$$

Donde $U_0 = 235820$. La ecuación adimensional de Schrödinger para el Hexacloroplatinato de Potasio, ahora viene dada por la siguiente expresión:

$$-\frac{d^2\psi}{d\theta^2} + U_0(1 - \cos 4\theta)\psi = \varepsilon\psi \quad (58)$$

La Ec. (58) se convierte en la ecuación de Mathieu si:

$$a = \frac{4}{16}(\varepsilon - U_0) \quad ; \quad q = \frac{2}{16}U_0 \quad (59)$$

De donde:

$$\varepsilon = \frac{16a}{4} + U_0 \quad (60)$$

Ahora, si θ es pequeño:

$$\cos 4\theta = 1 - \frac{(4\theta^2)}{2} \quad (61)$$

Y del cual se obtiene:

$$\varepsilon = 4\sqrt{\frac{U_0}{2}}(2n + 1) \quad (62)$$

Capítulo IV

4. Resultados y Análisis

En las Tablas 2 - 4 se muestran los valores de energías obtenidas para el péndulo cuántico normal, para el Etano y para el Hexacloroplatinato de Potasio.

Tabla 2: Algunos niveles de energía adimensionales para el péndulo y comparación con los estados de tipo Rotor y Oscilador para $U_0 = 2$.

Estados, n (n +1)	a_i, b_i	Energía del péndulo $\varepsilon = \frac{a_i}{4} + U_0$	Energía Oscilador armónico cuántico $\varepsilon = \sqrt{\frac{U_0}{2}}(2n + 1)$	Energía Rotor Libre $\varepsilon = \frac{n^2}{4} + U_0$
1	$a_0 = -4.2805$	0.9299	1.00	
2	$b_2 = 2.7469$	2.6867	3.00	
3	$a_2 = 6.8291$	3.7073	5.00	
4	$b_4 = 16.452$	6.1130		
5	$a_4 = 16.650$	6.1625		
6(7)	$b_6, a_6 = 36.229$	11.0572		11.00
8(9)	$b_8, a_8 = 64.127$	18.032		18.00
10(11)	$b_{10}, a_{10} = 100.08$	27.020		27.00
12(13)	$b_{12}, a_{12} = 144.06$	38.014		38.00

Tabla 3: Algunos niveles de energía adimensionales para el Etano y comparación con estados de tipo Rotor y Oscilador para $U_0 = 47,25$.

Estados, n (n +1)	a_i, b_i	Energía del péndulo $\varepsilon = \frac{9a_i}{4} + U_0$	Energía Oscilador armónico cuántico $\varepsilon = 3\sqrt{\frac{U_0}{2}}(2n + 1)$	Energía Rotor Libre $\varepsilon = \frac{9n^2}{4} + U_0$
1	$a_0 = -14.780$	13.95	14.5817	
2	$b_2 = -2.9118$	40.65	43.7450	
3	$a_2 = 7.5425$	64.17	72.9083	
4	$b_4 = 17.403$	86.36		
5	$a_4 = 21.579$	95.75		
6	$b_6 = 37.559$	131.7		
7	$a_6 = 37.709$	132.0		
8(9)	$b_8, a_8 = 64.884$	193.2		191.25
10(11)	$b_{10}, a_{10} = 100.56$	273.46		272.25

Tabla 4: Algunos niveles de energía adimensionales para K_2PtCl_6 y comparación con estados de tipo Rotor y Oscilador para $U_0 = 235820$.

Estados, n (n + 1)	a_i, b_i	Energía del péndulo $\varepsilon = \frac{16a_i}{4} + U_0$	Energía Oscilador armónico cuántico $\varepsilon = 4\sqrt{\frac{U_0}{2}}(2n + 1)$	Energía Rotor Libre $\varepsilon = \frac{16n^2}{4} + U_0$
1	$a_0 = -58613$	1368.0	1373.5	
2	$b_2 = -57927$	4112.0	4120.6	
3	$a_2 = -57242$	6852.0	6867.6	
4	$b_4 = -56559$	9584.0	9614.6	
⋮				
218	$b_{218} = 58734$	470756.0	597481.6	
219	$a_{218} = 58889$	471376.0	600228.7	
⋮				
996(997)	$b_{996}, a_{996} = 992454$	4205636.0		4203884
998(999)	$b_{998}, a_{998} = 996440$	4221580.0		4219836

De acuerdo a los resultados mostrados de las Tablas, podemos analizar y explicar muchas cosas que se abarcaron en el desarrollo de la trabajo. Primero se obtuvieron los valores de los coeficientes a_i y b_i que como se mencionó antes, son los valores propios, para los tres casos, es decir para el péndulo cuántico normal, para el péndulo cuántico del Etano y para el Hexacloroplatinato de Potasio, estos valores se utilizaron para encontrar la energía del péndulo en los diferentes estados. También debemos aclarar que se tomaron algunos estados $(n + 1)$ dentro de la misma fila ya que el valor propio era el mismo, por ejemplo, los estados 6 y 7 de la Tabla 2 tienen los coeficientes b_6 y a_6 que son iguales a b_7 y a_7 . En la tabla 3 y 4 sucede exactamente lo mismo con algunos estados, pero al momento de tomar los valores de la energía en las otras columnas solo se escribieron la energía del estado n .

Podemos también notar que la tercera columna, la energía del péndulo viene dada para todos los estados, pero la energía del oscilador armónico cuántico y la energía del rotor libre vienen dados solo para algunos estados. Esto especifica que el péndulo se puede estudiar o considerar desde dos perspectivas distintas, una con valores pequeños, para los cuales se comporta como un oscilador, y para el caso de valores grandes, el péndulo se va a comportar como un rotor. De esta manera, en ambos casos tanto para el oscilador como para el rotor los valores de energía tienden a ser parecidos, a los valores de energía del péndulo. Esto quiere decir que esta columna es un medidor para los dos extremos.

Muy por encima de la altura de la barrera, los valores propios a_i y b_i se vuelven esencialmente iguales incluso para q grande y los valores propios de energía son así doblemente degenerados. También aumentan con el cuadrado del índice i que, con el fin de ajustarse a la notación habitual para el rotor libre, se vuelve a etiquetar, con una ligera modificación, como n . (La relación entre i y n se aclara con las entradas en las dos primeras columnas de las Tablas 2, 3 y 4. Así, los valores propios de la energía se aproximan a los de un rotor libre con la suma del valor medio del pozo de potencial del péndulo, U_0 . Esta dependencia del cuadrado de n se ve fácilmente al considerar la Ec. (34).

Se reportaron algunos valores de energía para el oscilador y para el rotor porque para los demás estados habría una gran diferencia entre estos y los valores de energía del péndulo. Por ejemplo para la Tabla 2, se tomó los primeros tres para el oscilador, vemos que para el estado $n = 3$ la energía del péndulo es de 3.773 y para el oscilador es de 5, así que se aleja bastante de la energía del péndulo. Esto significa, que para esos estados en donde hay una diferencia considerable en los valores, el péndulo ya no lo podemos aproximar a ese sistema, ya sea a un oscilador o a un rotor rígido, por lo cual se toman valores para el otro extremo del pozo de potencial y así lograr que los valores de energía sean similares.

Para la Tabla 4, es decir para el Hexacloroplatinato de Potasio, en el caso del oscilador los valores de ambas energías entre la columna 3 y 4 son bastantes cercanos, pero al avanzar en los estados estas energías ya no concuerdan mucho, por ejemplo vemos para el estado 218 y 219 que la energía del péndulo y la energía del oscilador armónico difieren demasiado, así debemos pasar al otro extremo, es decir para el rotor, pero para que estos valores concuerden debemos seguir tomando más estado hasta llegar el estado 996 que es en donde básicamente ambos valores de energía, la columna 3 como de la columna 5 son casi parecidos. Esto significa que debido a la barrera de potencial tan grande, se tomaron más estados (a diferencia de las otras dos Tablas) para poder llegar al otro extremo, es decir, para el rotor libre y así ver que los valores de las energías sean bastantes similares.

4.1. Conclusiones

Al realizar este estudio de la teoría cuántica del péndulo podemos concluir que la solución para nuestra ecuación de Schrödinger que describe el comportamiento pendular desde el punto de vista de la mecánica cuántica son las funciones de Mathieu, que como se mencionó antes, son las funciones de onda para el sistema. También se puede concluir que el Etano y el Hexacloroplatinato de Potasio, simulan, un péndulo, el cual se puede estudiar como un oscilador y como un rotor rígido. Para el caso del péndulo normal entre $\varepsilon=0.929$ hasta $\varepsilon=2.68$ lo podemos aproximar a un oscilador armónico y de $\varepsilon=11.05$ a $\varepsilon=38.04$ lo podemos aproximar a un rotor rígido. En el caso del Etano, los primeros dos estados cuando $\varepsilon=13.95$ hasta $\varepsilon=40.67$ lo podemos aproximar a un oscilador y a partir del estado 8 como un rotor rígido. Con K_2PtCl_6 se puede aproximarse a un oscilador desde $\varepsilon=13.68$ hasta $\varepsilon=9584$, y para los estados 996 hasta 999 donde $\varepsilon=4205636$ se tomará como rotor.

También se concluyó que la energía del péndulo, la energía del oscilador y la del rotor libre, deben ser aproximadamente iguales como se dijo anteriormente en los análisis de resultados, para así considerar el péndulo como un oscilador armónico cuántico a pequeña escala o como un rotor rígido con valores grandes.

Apéndice

Cálculo de los coeficientes a_i y b_i

Los siguientes coeficientes son las expresiones para determinar los **valores propios** para el caso del oscilador armónico cuántico [\[7\]](#):

$$a_0 = -\frac{1}{2}q^2 + \frac{7}{128}q^4 - \frac{29}{2304}q^6 + \frac{68687}{18874368}q^8 + 0q^{10} \dots \quad (63)$$

$$b_1 = 1 - q - \frac{1}{8}q^2 + \frac{1}{64}q^3 - \frac{1}{1536}q^4 - \frac{11}{36864}q^5 + \frac{49}{589824}q^6 - \frac{55}{9437184}q^7 - \frac{265}{113246208}q^8 + 0q^9 \quad (64)$$

$$a_1 = \text{escriba } -q \text{ para } q \text{ en (64)}. \quad (65)$$

$$b_2 = 4 - \frac{1}{12}q^2 + \frac{5}{13824}q^4 - \frac{289}{79626240}q^6 + \frac{21391}{458647142400}q^8 + 0q^{10} \quad (66)$$

$$a_2 = 4 + \frac{5}{12}q^2 - \frac{763}{13824}q^4 + \frac{1002401}{79626240}q^6 - \frac{1669068401}{458647142400}q^8 + 0q^{10} \quad (67)$$

$$b_3 = 9 + \frac{1}{16}q^2 - \frac{1}{64}q^3 - \frac{13}{20480}q^4 + \frac{5}{16384}q^5 - \frac{1961}{23592960}q^6 + \frac{609}{104857600}q^7 + 0q^8 \quad (68)$$

$$a_3 = \text{escriba } -q \text{ para } q \text{ en (68)}. \quad (69)$$

$$b_4 = 16 + \frac{1}{30}q^2 - \frac{317}{864000}q^4 + \frac{10049}{2721600000}q^6 + 0q^8 \quad (70)$$

$$a_4 = 16 + \frac{1}{30}q^2 - \frac{433}{864000}q^4 + \frac{5701}{2721600000}q^6 + 0q^8 \quad (71)$$

$$b_5 = 25 + \frac{1}{48}q^2 + \frac{11}{774144}q^4 + \frac{1}{147456}q^5 + \frac{37}{891813888}q^6 + 0q^7 \quad (72)$$

$$a_5 = \text{escriba } -q \text{ para } q \text{ en (72)}. \quad (73)$$

$$b_6 = 36 + \frac{1}{70}q^2 + \frac{187}{43904000}q^4 + \frac{5861633}{92935987200000}q^6 + 0q^8 \quad (74)$$

$$a_6 = 36 + \frac{1}{70}q^2 + \frac{187}{43904000}q^4 + \frac{6743617}{92935987200000}q^6 + 0q^8 \quad (75)$$

Cuando $i > 7$, la siguiente fórmula es correcta en la medida en que incluye el término en q :

$$a_i, b_i = i^2 + \frac{1}{2(i^2 - 1)}q^2 + \frac{5i^2 + 7}{32(i^2 - 1)^3(i^2 - 4)}q^4 + \frac{9i^4 + 58i^2 + 29}{64(i^2 - 1)^5(i^2 - 4)(i^2 - 9)}q^6 + \dots \quad (76)$$

Para encontrar los coeficientes a_0 hasta a_4 , utilizaremos la siguiente ecuación:

$$a = \frac{-\frac{1}{2}q^2}{1 - \frac{1}{4}a} - \frac{\frac{1}{64}q^2}{1 - \frac{1}{16}a} - \frac{\frac{1}{576}q^2}{1 - \frac{1}{36}a} - \frac{\frac{1}{2364}q^2}{1 - \frac{1}{64}a} - \dots \quad (77)$$

El cálculo es ilustrado para a_0 . Para este caso se tomará $U_0 = 2$, donde $q = 2U_0$, así que $q = 4$. De la ecuación anterior vamos a tomar el primer término de la igualdad y sustituimos q , así que:

$$a = \frac{-\frac{1}{2}(4)^2}{1 - \frac{1}{4}a} \quad (78)$$

$$\frac{1}{4}a^2 - a - 8 = 0 \quad (79)$$

cuyas soluciones son:

$$a = 8 \quad ; \quad a = -4 \quad (80)$$

Reemplazamos el valor de $a = -4$ en el tercer término de la Ec. (77), tenemos:

$$\frac{1}{576}q^2 / (1 - \frac{1}{36}(-4)) = 0,025 \quad (81)$$

Y lo restamos el segundo término de la misma:

$$\frac{1}{64}q^2 / (1 - \frac{1}{16}(-4) - 0,025) = 0,2040 \quad (82)$$

Volvemos a sustituir en el primer término:

$$-\frac{1}{2}q^2 / (1 - \frac{1}{4}(-4) - 0,2040) = -4,45 \quad (83)$$

Luego, en la ecuación (77) sustituimos el valor de $a = -4$.

$$a_0 = \frac{-\frac{1}{2}(4)^2}{1 - \frac{1}{4}(-4)} - \frac{\frac{1}{64}(4)^2}{1 - \frac{1}{16}(-4)} - \frac{\frac{1}{576}(4)^2}{1 - \frac{1}{36}(-4)} - \frac{\frac{1}{2364}(4)^2}{1 - \frac{1}{64}(-4)} \approx -4,2805 \quad (84)$$

Ahora para los valores de los coeficientes de b_6 en adelante hasta a_{12} como se ve en la Tabla 2, tomamos las ecuaciones (74)-(76), teniendo en cuenta que $q = 4$.

$$b_6 = 36 + \frac{1}{70}(4)^2 + \frac{187}{43904000}(4)^4 + \frac{5861633}{92935987200000}(4)^6 \approx 36,229 \quad (85)$$

A continuación se muestra la programación que se realizó en el programa de Visual Studio 2022 con el lenguaje Fortran:

Program pendulo

```
call Tabla1
call Tabla2
call Tabla3
print*, 'Datos en .txt'
stop
end program
```

Subroutine Tabla1

real a(13),U,Ep(13),EOA(13),ERL(13)

Integer m

Open(10,file='Tabla1.txt', status='unknown')

a=[-4.2805,2.7469,6.8291,16.452,16.650,36.229,36.229,64.127,64.127,100.08,100.08,144.06,144.06]

U=2.0

do m=1,13

EP(m)=(a(m)*0.25) + U

!Energía del Pendulo

if(m=1 .and.m<=3)then

EOA(m)=(2*(m-1)+1)*sqrt(U*0.5)

!Energía del Oscilador Armónico

else if (m>=6)then

ERL(m)=((m**2)*0.25) + U

!Energía del Rotor Libre

end if

```
write(10,900) m, a(m),Ep(m),EOA(m),ERL(m)
enddo
```

```
900 format(I5,5f12.4)
return
End Subroutine Tabla1
```

Subroutine Tabla2

```
real a(11),U,Ep(11),EOA(11),ERL(11)
```

```
Integer m
```

```
Open(10,file='Tabla2.txt', status='unknown')
```

```
a=[-14.780,-2.9118,7.5425,17.403,21.579,37.559,37.709,64.884,64.884,100.56,100.56]
U=47.25
```

```
do m=1,11
```

```
EP(m)=(9*a(m)*0.25) + U !Energía del Pendulo
```

```
if( m/=1 .and.m<=3 )then
```

```
EOA(m)=(2*(m-1)+1)*3.0*sqrt(U*0.5) !Energía del Oscilador Armónico
```

```
else if (m>=8)then
```

```
ERL(m)=((9*m**2)*0.25) + U !Energía del Rotor Libre
```

```
end if
```

```
write(10,900) m, a(m),Ep(m),EOA(m),ERL(m)
```

```
enddo
```

```
900 format(I5,5f12.4)
```

```
return
```

```
End Subroutine Tabla2
```

Subroutine Tabla3

```
real U,Ep(11),EOA(11),ERL(11)
```

```
Integer n,a(10),m(10)
```

```
Open(10,file='Tabla3.txt', status='unknown')
```

```
a=[-58613,-57927,-57242,-56559,58734,58889,992454,992454,996440,996440]
```

```
m=[1,2,3,4,218,219,996,997,998,999]
```

```
U=235820
```

```
do n=1,10
```

```
EP(n)=(4*a(n)) + U !Energía del Pendulo
```

```

if( n>=1 .and.n<=6 )then
EOA(n)=(2*(m(n)-1)+1)*4.0*sqrt(U*0.5)      !Energía del Oscilador Armónico
else if (n>=7)then
ERL(n)=((16*(m(n))**2)*0.25) + U          !Enrgía del Rotor Libre
end if
write(10,900) m(n), a(n),Ep(n),EOA(n),ERL(n)
enddo

900 format(2I10,3f12.1)
return
End Subroutine Tabla3

```

Se debe aclarar que se tomó los estados como m ya que para la programación del Hexacloplatino de Potasio se tuvo que vectorizar los estados, así que se asignó m al vector (los estados) y n se tomó como el contador “Do”.

A continuación se muestra las gráficas para los coeficientes a_i y b_i . Paralos valores a_i :

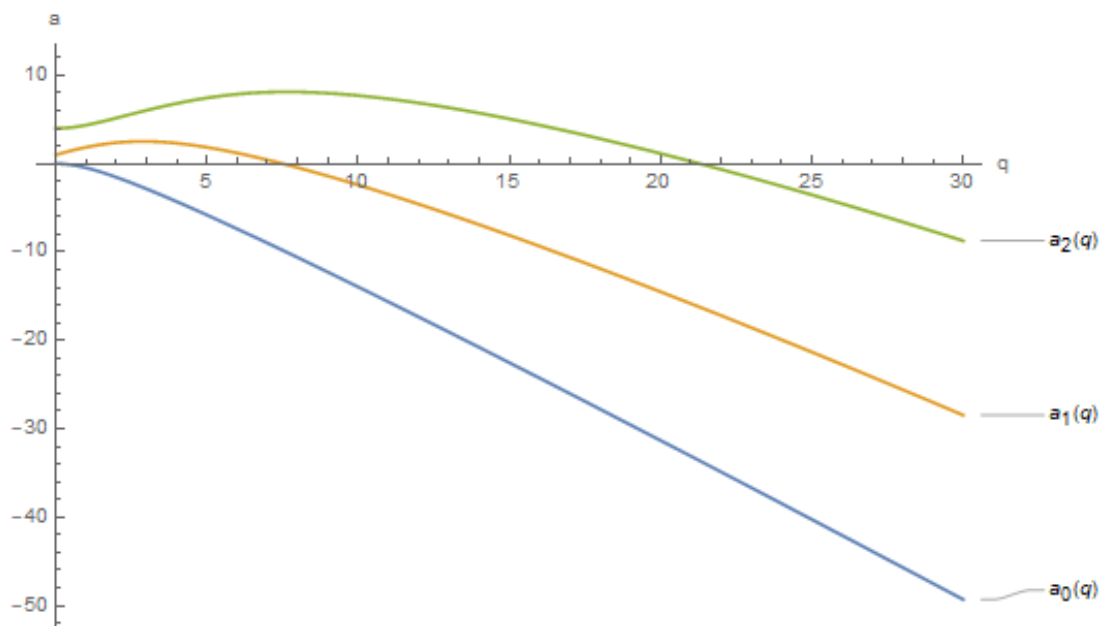


Figura 6: Valores Propios a_i

Para los valores b_i , la gráfica correspondiente es:

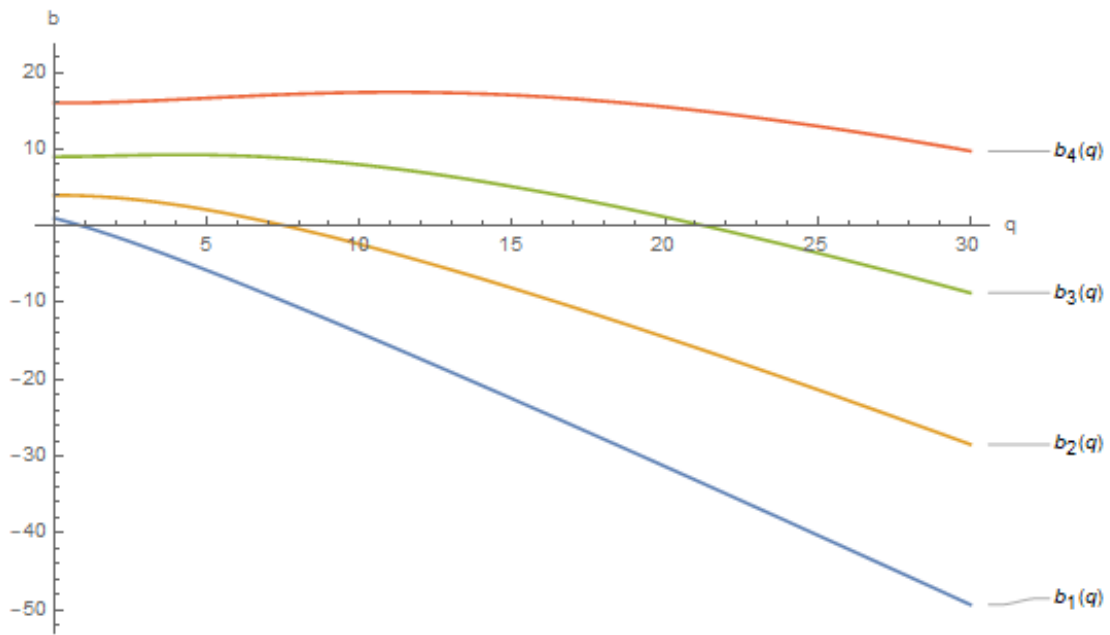


Figura 7: Valores Propios b_i

5. Referencias

- [1] Edward U. Condon *The Physical Pendulum in Quantum Mechanics*. Columbia University, Departamento de Física; febrero 21, 1928. [9](#)
- [2] G. L. Beker; A. Blackburb & H.J Smith, *The Quantum Pendulum: Small and Large*. Citación: Am. J. Phys. 70, 525 (2002), Publicado por “The American Association of Physics Teachers”. [9](#), [24](#), [25](#), [26](#)
- [3] G. L. Beker & A. Blackburb. *The Pendulum, a case study in physics*. Oxford University Press 2005. [7](#), [11](#), [23](#), [25](#)
- [4] L. de la Peña. *Introducción a la mecánica cuántica*. Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, febrero de 1991. [11](#), [12](#)
- [5] Eisberg & Resnick *Física Cuántica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos y partículas*. Editorial LIMUSA, México [11](#), [12](#), [13](#)
- [6] T. Pradhan & A. V. Khare. *Plane Pendulum in Quantum Mechanics*. Citación: American Journal of Physics 41, 59 (1973); publicado por “The American Association of Physics Teachers”. [16](#)
- [7] N. W. McLACHLAN. *Theory and Application of Mathieu Functions*. Oxford University Press, London E.C.4 (1947). [19](#), [20](#), [21](#), [30](#)
- [8] L. Chaos-Cador & E. Ley-Koo *Mathieu functions revisited: matrix evaluation and generating functions*. Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, febrero de 2002. [20](#), [22](#)
- [9] J. González. *Estudios analíticos de la ecuación de Mathieu*. Universidad de Sonora. Division de Ciencias exactas y naturales, departamento de Matematicas. Hermosillo, Sonora, México, Febrero 2007. [21](#), [22](#)
- [10] J. G. Enrique & J. A. Fabio *Pendulum Beams: A Window into the Quantum Pendulum*. Department of Physics and Astronomy, Colgate University, Hamilton, New York. [17](#)