

TEMA 2. APLICACIONES DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

ACTIVIDAD EXTRA: GRÁFICO DE FUNCIONES DE ONDA VIBRACIONALES

El segundo tema de la asignatura tiene que ver con la aplicación de la ecuación de Schrödinger para conocer las funciones de onda y las energías asociadas a los movimientos de rotación, traslación y vibración de las partículas. Uno de los aspectos que resultan difíciles de comprender tiene que ver con los cambios que sufre la función de onda al aumentar el número cuántico vibracional. En esta actividad se propone la utilización de una herramienta que permite calcular y graficar las funciones de onda de diferentes estados vibracionales.

Objetivos:

- Visualizar los cambios en la forma de las funciones de onda vibracionales al aumentar el número cuántico vibracional.
- Identificar números de nodos, las ecuaciones que las representan y cómo varía la densidad de probabilidad en función del desplazamiento.

CONSIGNA DE LA ACTIVIDAD 2

En este tema hemos estudiado tres tipos de movimientos y cómo aplicar la ecuación de Schrödinger para conocer las funciones de onda y las energías asociadas a estos movimientos. Ahora vamos a observar gráficamente la forma de esas funciones de onda. Para eso vamos a utilizar la [Calculadora Keisan](#). A continuación se detallan las actividades a realizar con esta herramienta:

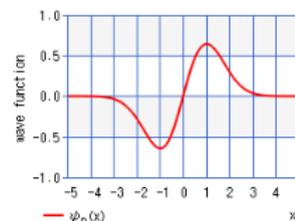
1. Utilice el enlace para abrir la herramienta. Al hacerlo se encontrará con la siguiente pantalla:

Wave function of harmonic oscillator (chart) Calculator

Home / Science / Atom and molecule

Calculates a table of the quantum-mechanical wave function of one-dimensional harmonic oscillator and draws the chart.

It calculates values of the position x in the unit of $a=\sqrt{(2\pi m\omega/\hbar)}=1$.



Quantum number n n=0,1,2,3,...
 [Initial position x of electron
 Increment , Repetition]

x	$\psi_n(x)$

- Seleccione los siguientes valores para los parámetros en azul:

 - Initial position $x = -4$
 - Increment = 0.2
 - Repetition = 40
- La calculadora graficará la función de onda de acuerdo al número cuántico vibracional que usted seleccione. Este número no está simbolizado con la letra griega v como sucede habitualmente, sino que está simbolizado con la letra n . Seleccione el valor cero para este parámetro y presione "Execute"
- Además de la gráfica obtendrá una tabla de valores de x y de $\Psi_n(x)$. Copie cada columna a una columna de un archivo de Hojas de cálculo, cuidando de identificarlas correctamente. Calcule $|\Psi_n(x)|^2$ y grafique ambas funciones.
- Repita el procedimiento para $n = 1, 5$ y 15 usando las condiciones indicadas en la siguiente tabla:

v	Initial position x	Increment	Repetition
1	-4	0.2	40
5	-5	0.2	50
15	-8	0.2	80

6. ¿Qué conclusiones puede sacar de estas gráficas?
7. Grafique $|\Psi_n(x)|^2$ para las cuatro funciones en una misma gráfica. ¿Qué conclusiones puede sacar de esta gráfica? ¿Puede establecer alguna relación entre la física clásica y la física cuántica? ¿Qué sucede con los intervalos en los que se extienden las funciones de onda?
8. Prepare un informe incluyendo las gráficas que elaboró y todas las conclusiones que sacó. Súbalo en el aula virtual de la materia.