

PROYECTO DE INNOVACIÓN Y MEJORA DOCENTE  
ID2012/088

**MATHEMATICA COMO LABORATORIO EN QUIMICA FISICA I**

*Jesús Aldegunde Carrión*  
*M<sup>a</sup> Dolores González Sánchez*

Departamento de Química Física  
Universidad de Salamanca

Junio 2013

## 1 Objetivos

Según se recoge en la Memoria de Solicitud presentada, la asignatura de Química Física I del Grado en Química de la Universidad de Salamanca consta de 3 ECTS teórico-prácticos y 6 ECTS de laboratorio. Desde un primer momento se consideró que “Teniendo en cuenta los contenidos teóricos de la asignatura, las clases con ordenador en grupo reducido son consideradas como prácticas de laboratorio”. Por lo tanto, las prácticas de esta asignatura se encuadran perfectamente en el perfil de “Prácticas en aulas especializadas”.

La preparación coordinada de la docencia (teórico-práctica y de laboratorio) de esta asignatura posibilita la distribución de las sesiones prácticas a lo largo de todo el cuatrimestre. Se constituyen entonces como una herramienta de consolidación de conocimientos, mediante la participación activa de los estudiantes. La realización de estas actividades prácticas paralelamente a la exposición de los contenidos teóricos incrementa su valor docente.

En la preparación estos 6 ECTS prácticos se va a hacer uso del programa Mathematica®. Esta herramienta facilita un aprendizaje interactivo por parte del alumno, lo cual responde a la innovación docente imprescindible dentro de la implantación de los nuevos planes de estudio en el marco del Espacio Europeo de Educación Superior (EEES).

Las clases de laboratorio (aulas de informática) incluirían sesiones de explicación, en las cuales se exponen los objetivos de la práctica, revisión de la teoría, desarrollo, etc., y sesiones en las que es el alumno el que lleva a cabo por sí mismo el trabajo, consultado con el profesor en caso necesario. Una vez finalizada la práctica, el alumno debe presentar a través de la plataforma *Stadium* un fichero de Mathematica® en el que se recojan las tareas realizadas, las respuestas a las cuestiones planteadas, etc.

Se esperan entonces mejoras en los siguientes aspectos esenciales:

- La comprensión de la asignatura por parte de los alumnos, al presentar coordinadamente los contenidos teóricos y prácticos.
- El aprendizaje por parte del estudiante, ya que de este modo el alumnos adquiere un papel activo en al construcción del conocimiento.
- La evaluación continua que el profesorado tiene que llevar a cabo del proceso de enseñanza-aprendizaje (de los alumnos y de su actividad también).
- La coordinación entre el profesorado implicado en la docencia.

## 2 Descripción de las actividades propuestas

Básicamente, el trabajo que se planteaba en el proyecto consistía en la preparación de los créditos prácticos de la asignatura Química Física I. El curso 2013-14 será el tercer año en el que se imparta la asignatura, y con la experiencia que se ha tenido, será posible llevar a cabo una planificación bastante innovadora, en relación con los planteamiento clásicos de las prácticas.

### 3 Resultados

Básicamente se ha llevado a cabo una selección de los contenidos prácticos de modo coordinado con la parte teórica de la asignatura. Como punto de partida teníamos las prácticas que se han impartido estos dos últimos cursos, pero además se buscaron nuevos recursos ya existentes para esas prácticas, intentando aprovechar lo que se encuentran publicados tanto en repositorios como en revistas especializadas (como *Journal of Chemical Education* JCE) o en el portal de Wolfram "Wolfram Demonstrations Project" (WDP). Finalmente, se ha elaborado la estructura del guión de prácticas que se facilitará a los alumnos.

#### ***Tareas realizadas***

Una vez terminado el primer cuatrimestre del curso 2012-13, comenzamos a trabajar en las prácticas de la asignatura "Química Física I" del Grado en Química, del siguiente modo:

1. **Evaluación** de la docencia impartida en este curso 2012-13. Revisión de la anterior, curso 2011-12. Después de dos cursos de docencia, tenemos acumulada bastante información que nos permitirá corregir errores de base, y mejorar los aspectos en los que hemos detectado deficiencias:
  - Hemos detectado que es necesario afianzar los contenidos matemáticos de los alumnos, ya que presentan muchas carencias en el dominio de esta herramienta.
  - Algunas prácticas resultaban demasiado 'mecánicas', de modo que los alumnos repetían el procedimiento una y otra vez, sin que esto les aportara nada nuevo.
  - Existen problemas de notación, tanto dentro de las prácticas, como en relación con los contenidos teóricos.
  - Es necesario redimensionar algunas de las prácticas, en función de la dificultad computacional que tienen.
  
2. **Selección de prácticas** para el curso 2013-14. Coherente con la evaluación anterior, intentado buscar recursos en WDP y en JCE. Las prácticas se han planteado como apoyo y complemento de la docencia teórica, de modo que se ha intentado distribuir las uniformemente de acuerdo con el programa de la asignatura. En principio se han previsto 10 sesiones prácticas de 3 horas cada una, correspondientes a las siguientes prácticas:
  - Introducción a Mathematica®.
  - Herramientas matemáticas en Química Física
  - Problemas sencillos: Partícula en una caja (2 sesiones)
  - Problemas sencillos: Oscilador Armónico
  - Átomos hidrogenoides
  - Representación matricial
  - Potencial de Morse

- Molécula  $H_2^+$
  - Espectroscopia
3. **Preparación de las prácticas:** desarrollo en Mathematica®. Se han introducido cambios y mejoras en las prácticas realizadas hasta ahora, a partir de los nuevos recursos encontrados tanto en WCP, JCE y otros repositorios. Los ficheros de Mathematica® se han preparado de modo que los alumnos los utilicen para realizar en ellos la práctica y presentar el informe correspondiente. En todos ellos se ha puesto mucha atención a la notación empleada, así como a los sistemas de unidades, de modo que sea coherente con los contenidos teóricos de la asignatura. En el *Anexo I* se presenta el fichero de Mathematica correspondiente a la práctica de la Partícula en una caja, a modo de ejemplo.
4. **Elaboración de los guiones** de prácticas: En los guiones se han incluido los contenidos de la práctica, los objetivos a conseguir, las cuestiones teóricas fundamentales de la práctica, el desarrollo de la misma, tareas y cuestiones, y finalmente alguna referencia bibliográfica cuando ha sido necesaria. Igual que en la preparación de las prácticas, se ha atendido especialmente a la notación y a los sistemas de unidades. En el *Anexo II* se presenta el fichero del guión que se facilita a los alumnos para la realización de la práctica de la Partícula en una caja, a modo de ejemplo.

## 4 Conclusiones

En una asignatura como Química Física I, esencialmente teórica, los contenidos prácticos se plantean en forma de clases con ordenador. La complejidad conceptual de la Mecánica Cuántica y la Espectroscopia puede reducirse si los alumnos trabajan directamente con herramientas computacionales que les permiten ir construyendo el conocimiento por sí mismos.

Se ha trabajado en la mejora de los materiales para las prácticas, incorporando nuevos recursos disponibles en la red, preparando los ficheros de Mathematica y elaborando los guiones de prácticas. Después de dos cursos impartiendo la parte práctica de esta asignatura, hemos podido llevar a cabo un *feedback* importante, y se han mejorados bastante tanto los contenidos como los materiales.

## ***Anexo I***

## Práctica 3: Problemas sencillos (1).

### Partícula en una caja 1D

### Resolución de la ecuación de Schrödinger: Parte A

#### Tareas:

1.- Con el procedimiento propuesto, encuentra la energía del estado fundamental ( $n=1$ ) de una partícula en el pozo de potencial ya definido  $V(x)$  con seis cifras decimales. Después, determina las energías de los cuatro siguientes estados con cuatro cifras decimales, eligiendo los valores correctos de energía.

2.- Representa estas seis primeras funciones de onda. Describe la relación entre el número cuántico del estado y la forma de la función de onda.

3.- Encuentra las tres primeras energías de :

- \* Un pozo que sea la mitad de ancho,
- \* otro que sea el doble de ancho.

Establece la relación numérica entre los tres conjuntos de energías. Justifícala.

#### Otras cuestiones:

- Comprueba para alguno de los estados obtenidos anteriormente la expresión para la energía vista en la introducción.

- ¿Cómo cambia la curvatura de la función de onda cuando la energía de la partícula aumenta? Justifícalo.

- ¿Qué relación hay entre el número de nodos de la función de onda y el número cuántico?

- Analiza el comportamiento de la función de onda frente a la reflexión derecha/izquierda en el centro de la caja. Relacionalo con el valor de  $n$ .

- ¿Qué dos criterios de clasificación de las soluciones particulares podríamos establecer?

## ***Anexo II***

## Problemas sencillos resueltos en MQ (1)

J. Aldegunde, L. González  
Departamento de Química Física  
Universidad de Salamanca

Curso 13-14

## Bibliografía

Tisko, E. L. J. Chem. Educ. 2003, 80, 981.  
Grushaw, A. J. Chem. Educ. 2005, 82, 175.

## Índice

- 1 Partícula en una caja monodimensional

## Partícula en una caja 1D: contenidos

- Ver una variedad de funciones de onda de partículas en una caja con diferentes funciones de potencial.
- Ver cómo la aplicación de las condiciones límite hacen que los niveles de energía de la partícula en una caja estén cuantizados.
- Verificar la relación entre número cuántico y energía para una partícula en una caja sencilla.
- Ver la relación entre la longitud de la caja y la energía para una partícula en una caja sencilla.
- Ver cómo el requisito de función de onda finita fuerza el efecto túnel en una barrera de potencial.
- Ver cómo aumentando la energía del potencial disminuye la energía crítica y así decrece la curvatura de la función de onda.
- Familiarizarse con los procesos numéricos iterativos.





### Partícula en una caja 1D: introducción

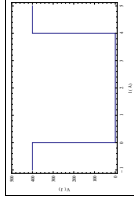
En esta práctica examinaremos los efectos de la función de energía potencial sobre las energías y funciones de onda de una partícula confinada en una caja.

Para ello, seguiremos en cada caso los siguientes pasos:

- Consideraremos a continuación una función de potencial.
- Resolveremos la ecuación de Schrödinger que nos permitirá usar *Mathematica* para poder visualizar los resultados.
- Variaremos la energía de la partícula de modo que la solución cumpla las condiciones de contorno correctas.

### Construcción de la función de energía potencial

Podemos representar la función de potencial de la siguiente modo:



La definición de la función de energía potencial se hace con la función *Plot* de *Mathematica*:

```
Plot[V[x], {x, -L, L}, PlotStyle -> {Red, Thick}, PlotRange -> {0, V0}]
```

Esta función generará un valor de 400 cuando  $x$  sea mayor que  $L$  o menor que  $0$ . En otro caso,  $V(x) = 0$ .

La línea de representación de la función de energía potencial debe estar siempre representada en el eje  $x$ .

Para  $V(x)$  se debe usar  $\{x, -L, L\}$ ,  $PlotStyle \rightarrow \{Red, Thick\}$ ,  $PlotRange \rightarrow \{0, V0\}$ .

Revisa esta representación, y cómo se ha trabajado con las unidades.

### Partícula en una caja 1D: introducción

En esta práctica examinaremos los efectos de la función de energía potencial sobre las energías y funciones de onda de una partícula confinada en una caja.

Para ello, seguiremos en cada caso los siguientes pasos:

- Consideraremos a continuación una función de potencial.
- Resolveremos la ecuación de Schrödinger que nos permitirá usar *Mathematica* para poder visualizar los resultados.
- Variaremos la energía de la partícula de modo que la solución cumpla las condiciones de contorno correctas.

### Resolución de la ecuación de Schrödinger

Dentro de la caja, se trata de una partícula libre, y los estados estacionarios cumplirán:

$$\hat{H}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \quad (0 \leq x \leq L)$$

Pero tenemos que considerar la presencia de las paredes del pozo de potencial, por lo que trabajaremos con esta ecuación diferencial de segundo orden:

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

Como desconocemos tanto la energía como la función de onda de los estados, lo que haremos será tomar una energía de prueba para el sistema, obtener la función de onda correspondiente e ir variando la energía hasta que se cumplan las condiciones de contorno. También es necesario definir previamente las constantes físicas que nos aparecen en la ecuación.

```
(*Trabaja siempre en el eje x*)
h := 1.05457196 * 10^-34 (* h en J*s *)
m := 9.10938291 * 10^-31 (* kg *)
```

```
(*Energía de prueba, en J*s*)
energPr = 0.5 * 10^-17
```

### Resolución de la ecuación de Schrödinger

Para resolver la ecuación de Schrödinger en el caso de una partícula en una caja, utilizaremos el paquete *Mathematica* de *Mathematica*. Para ello, utilizaremos las siguientes expresiones numéricas tanto de una ecuación diferencial ordinaria, como de un sistema formado por varias de ellas:

```
RSolve[{eqns}, Y, {x, xMin, xMax}]
```

- En nuestro caso (eqns) serán la ecuación diferencial y dos condiciones de contorno:
  - $\psi(0) = 0$  en el borde izquierdo de la barrera de potencial.
  - $\psi(L) = 0$  en el borde derecho de la barrera de potencial.
- En el siguiente argumento indicamos que función se tiene que resolver.
- A eso sigue la variable independiente y el intervalo en el cual se resuelve la ecuación diferencial.

Obtendremos la solución de la siguiente modo:

```
Solve[RSolve[{eqns}, psi, {x, xMin, xMax}]
```

Partícula en una caja microscópica

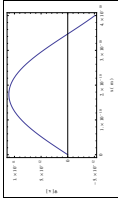
## Resolución de la ecuación de Schrödinger

Podemos representar la solución obtenida:

Para  $\psi(x)$  en  $\mu\text{m}$  (de 0 a 1)   
 Para  $\psi(x)$  en  $\text{\AA}$  (de 0 a 10)   
 Para  $\psi(x)$  en  $\text{\AA}$  (de 0 a 10)

Y obtener el valor de la función en  $x = L$ .

Para  $L = 10$   $\psi(10) = 5,88827 \times 10^{-11}$



Debería ser  $\psi(0) = \psi(L) = 0$ ;   
 Necesario cambiar la energía

Redefinimos el valor de **Energy** y repetimos el procedimiento hasta obtener una función de onda válida.

Partícula en una caja microscópica

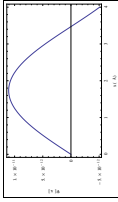
## Resolución de la ecuación de Schrödinger

Podemos representar la solución obtenida:

Para  $\psi(x)$  en  $\mu\text{m}$  (de 0 a 1)   
 Para  $\psi(x)$  en  $\text{\AA}$  (de 0 a 10)   
 Para  $\psi(x)$  en  $\text{\AA}$  (de 0 a 10)

Y obtener el valor de la función en  $x = L$ .

Para  $L = 10$   $\psi(10) = 5,88827 \times 10^{-11}$



Debería ser  $\psi(0) = \psi(L) = 0$ ;   
 Necesario cambiar la energía

Redefinimos el valor de **Energy** y repetimos el procedimiento hasta obtener una función de onda válida.

Partícula en una caja microscópica

## Resolución de la ecuación de Schrödinger: Parte A

- Ejerc:**
- Con el procedimiento propuesto, encuentra la energía del estado fundamental ( $n=1$ ) de una partícula en el pozo de potencial ya definido  $V(x)$  con seis cifras decimales. Después, determina las energías de los cuatro siguientes estados con seis cifras decimales.
  - Representa estas seis primeras funciones de onda. Describe la relación entre el número cuántico del estado y la forma de la función de onda.
  - Encuentra las cinco primeras energías de:
    - un pozo que sea la mitad de ancho,
    - un pozo que sea el doble de ancho.
 Establece la relación numérica entre los tres conjuntos de energías. Justificalas.

Partícula en una caja microscópica

## Resolución de la ecuación de Schrödinger: Parte A

- Otras cuestiones:**
- Completar para alguno de los estados obtenidos anteriormente la expresión para la energía vista en la introducción.
    - ¿Cómo cambia la energía de la función de onda cuando la energía de la partícula cambia?
  - ¿Qué relación hay entre el número de nodos de la función de onda y el número cuántico?
  - Analiza el comportamiento de la función de onda frente a la reflexión derecha/izquierda en el centro de la caja. Relacionalo con el valor de  $n$ .
    - ¿Qué dos criterios de clasificación de las soluciones particulares podríamos establecer?