



División de Ciencias Básicas e Ingenierías
Posgrado en Ciencias (Química)

**“Cálculo numérico de la transformada de Fourier en sistemas
cuánticos confinados unidimensionales”**

Tesis para obtener el grado de
Maestra en Ciencias (Química)

Presenta

Q. Karen Leticia Trejo González

Matrícula: 2223803345

Correo: karlet96@hotmail.com

Asesor de tesis:

Dr. Robin Preenja Sagar (UAM-I)

Jurado:

Presidente: Dr. Julio Manuel Hernández Pérez (BUAP)

Secretario: Dr. Humberto Laguna Galindo (UAM-I)

Vocal: Dr. Norberto Aquino Aquino (UAM-I)

Iztapalapa, Ciudad de México, 2 de diciembre de 2025.

*A mis padres, hermanos, sobrinos y amigos,
por ser hogar en medio del caos.*

Agradecimientos

Quiero expresar mi más sincero agradecimiento a mi asesor de maestría, el Dr. Robin Preenja Sagar, por su constante apoyo durante esta investigación. Las discusiones que compartimos fueron profundamente enriquecedoras y siempre llenas de reflexión. Agradezco también su generosidad y confianza en mí a lo largo de este proceso.

A mi comité de seguimiento, gracias por acompañarme y respaldarme en cada etapa de la maestría.

Al Dr. Humberto Laguna, por su guía en diversos aspectos de esta investigación, especialmente por las conversaciones que impulsaron nuevas ideas.

Al Dr. Francisco Méndez, por permitirme asistir a sus clases, donde encontré un espacio de concentración y refugio, y donde esta tesis fue tomando forma.

A la Dra. Rubí Vargas y al Dr. Francisco Tello, gracias por su orientación, apoyo y por estar dispuestos a escucharme en los momentos en que más lo necesitaba.

A mis padres, por su amor incondicional y su presencia constante. A mis hermanos, por su aliento y confianza. A mis sobrinos, por su cariño, su alegría y por ser un motor importante en este camino.

A mis amigos, por acompañarme con paciencia, afecto y apoyo sincero.

Finalmente, agradezco a SECIHTI por el respaldo económico que me permitió dedicarme de lleno a esta etapa formativa.

Índice general

Índice de figuras	7
Índice de cuadros	12
Introducción	14
1. Los inicios de la mecánica cuántica y los sistemas cuánticos confinados	17
1.1. La función de onda y la ecuación de Schrödinger	19
1.2. Sistemas cuánticos	21
1.2.1. Sistemas cuánticos confinados	23
2. Espacio de posición y momento, y relaciones de incertidumbres	29
2.1. Relación fundamental entre posición y momento	30
2.2. Relaciones de incertidumbre cuánticas	31
2.2.1. Principio de incertidumbre	31
2.2.2. Relaciones de incertidumbre entrópicas	33
3. Transformada Fourier (Transformada de Dirac-Fourier)	35
3.1. Transformada de Fourier (TF)	35
3.2. Transformada de Dirac-Fourier (TDF)	37
3.2.1. Aplicación en sistemas cuánticos confinados	38
3.2.2. Naturaleza oscilatoria del integrando	38
3.3. Métodos de Newton-Cotes	41
3.3.1. Regla del Trapecio	42
3.3.2. Regla de Simpson _{3/8}	43

3.4. Métodos enfocados con integrandos altamente oscilatorias	44
3.4.1. Método de Filon	44
3.4.2. Método de Clenshaw–Curtis	47
4. Plantamiento del problema	49
4.1. Objetivos	49
4.1.1. Objetivos específicos	49
4.2. Metodología	50
4.2.1. Métodos utilizados	53
4.2.2. Implementación computacional de los métodos	69
5. Resultados	72
5.1. Métodos aplicados a la partícula en una caja	72
5.1.1. Análisis del estado basal PIAB ($n = 1$)	73
5.1.2. Análisis de los estados excitados de la PIAB	77
5.2. Métodos aplicados al oscilador armónico confinado	81
5.2.1. Análisis del estado basal HOC($n = 0$)	81
5.2.2. Análisis de los estados excitados del HOC	83
6. Conclusiones y perspectivas	88
6.1. Conclusiones generales.	88
6.2. Conclusiones específicas	88
6.3. Perspectivas	90
Bibliografía	92
Apéndice	97
1. Desarrollo de las fórmulas de cuadratura	97
1.1. Método del trapecio	97
1.2. Método de Simpson	99
1.3. Método de Simpson _{3/8}	101
1.4. Método de Filon (Trapecio-Filon)	104
1.5. Método de Simpson-Filon	105
1.6. Método de Simpson _{3/8} -Filon	107

2.	Más métodos numéricos	109
2.1.	Métodos aplicados a la PIAB	115
2.2.	Métodos aplicados a la HOC	117
3.	Análisis según el número de subintervalos N	119
3.1.	Partícula en una caja	119
4.	Método Clenshaw-Curtis- Filon CCF y sus implicaciones.	123
4.1.	Análisis de a_k	124
4.2.	Análisis de ω_k	127
4.3.	Análisis de los coeficientes ω_k	127
4.4.	Evaluación del método CCF para la transformada de Dirac- Fourier mediante NIntegrate en Mathematica	129
5.	Organización de los Códigos de Implementación	134
5.1.	Sistema PIAB	134
5.2.	Sistema HOC	135

Índice de figuras

1.1. Funciones de onda correspondientes a los primeros niveles energéticos del sistema de la partícula en una caja en un intervalo $[-1, 1]$, para distintos valores del número cuántico principal n .	26
1.2. Funciones de onda correspondientes a los primeros niveles energéticos del sistema del HOC en un intervalo $[-1, 1]$, para distintos valores del número cuántico principal n .	28
3.1. Funciones $\psi_1(x) \cos(px)$ del sistema PIAB en el estado fundamental para $p = 1$.	40
3.2. Funciones $\psi_1(x) \cos(px)$ del sistema PIAB en el estado fundamental para $p = 80$.	40
4.1. Gráficas de $\log_{10}(\text{Error relativo})$ en función del momento p , al aplicar el método del trapecio compuesto para el sistema PIAB en su estado fundamental. La gráfica de la izquierda corresponde a $N = 50$, mientras que la de la derecha a $N = 100$.	52
5.1. Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson _{3/8} -Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema PIAB con $n = 1$.	74

5.2. Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson $_{3/8}$ -Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema PIAB con $n = 2$	78
5.3. Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson $_{3/8}$ -Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema PIAB con $n = 3$	78
5.4. Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson $_{3/8}$ -Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema PIAB con $n = 4$	79
5.5. Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson $_{3/8}$ -Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema PIAB con $n = 5$	79

5.6. Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson $_{3/8}$ -Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema PIAB con $n = 6$	79
5.7. Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson $_{3/8}$ -Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema PIAB con $n = 7$	80
5.8. Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson $_{3/8}$ -Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema PIAB con $n = 8$	80
5.9. Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson $_{3/8}$ -Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema HOC con $n = 0$	82

5.10. Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson $_{3/8}$ -Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema HOC con $n = 1$ 84

5.11. Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson $_{3/8}$ -Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema HOC con $n = 2$ 85

5.12. Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson $_{3/8}$ -Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema HOC con $n = 3$ 86

5.13. Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson $_{3/8}$ -Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema HOC con $n = 4$ 87

1. Transformada de Fourier para el estado basal ($n = 1$) de PIAB con $N = 50$ particiones. Se comparan los métodos de integración: Simpson clásico, Simpson $_{3/8}$, Trapecio-Filon y Simpson-Filon. . . 115

2.	Transformada de Fourier para el su primer estado excitado ($n = 2$) de PIAB con $N = 50$ particiones. Se comparan los métodos de integración: Simpson clásico, Simpson _{3/8} , Trapecio-Filon y Simpson-Filon.	116
3.	Transformada de Fourier para el estado basal ($n = 0$) de HOC con $N = 50$ particiones. Se comparan los métodos de integración: Simpson clásico, Simpson _{3/8} , Trapecio-Filon y Simpson-Filon.	117
4.	Transformada de Fourier para el su primer estado excitado ($n = 1$) de HOC con $N = 50$ particiones. Se comparan los métodos de integración: Simpson clásico, Simpson _{3/8} , Trapecio-Filon y Simpson-Filon.	118
5.	Comportamiento de las funciones de onda $\psi_n(\theta, k)$ del sistema PIAB transformadas mediante el cambio de variable $x = \cos \theta$, para distintos valores de n ($n = 1, 2, 7$) y factores del tipo $\cos(k\theta)$ ($k = 0$ (color negro), 1 (color verde), 5 (color azul) y 10 (color rojo)).	124
6.	Función ω_k con kernel $\cos(p \cos \theta)$ variando p	128
7.	Función ω_k con kernel $\sin(p \cos \theta)$ variando p	128
8.	Resultados obtenidos al calcular la transformada de Dirac-Fourier para el sistema de la partícula en una caja, utilizando el método Clenshaw-Curtis-Filon implementado mediante la rutina <code>NIntegrate</code> de <i>Mathematica</i> con los parámetros por defecto. En la gráfica se muestra el comportamiento del logaritmo base 10 del error relativo (ER) comparado con la solución analítica, en función del número cuántico n .	132
9.	Resultados obtenidos al calcular la transformada de Dirac-Fourier para el sistema de la partícula en una caja, utilizando el método Clenshaw-Curtis-Filon (CCF) implementado mediante la rutina <code>NIntegrate</code> de <i>Mathematica</i> con los parámetros por defecto. En la gráfica se muestra el comportamiento del logaritmo base 10 del error relativo (ER) comparado con la solución analítica, en función del número cuántico n .	133

Índice de cuadros

1. Notación utilizada en el documento	13
4.1. Características principales de los métodos numéricos empleados	68
4.2. Principales usos de la función <code>NIntegrate</code> en el desarrollo de esta investigación.	71
5.1. Comparación de log-errores relativos $\log_{10}(\text{ER})$ de la TDF para PIAB en el estado base con diferentes variantes numéricos (fragmento).	76
1. Errores relativos para la partícula en una caja con $n = 1$, distintos valores de p , subintervalos N y métodos numéricos.	120
2. Errores relativos para la partícula en una caja con $n = 5$, distintos valores de p , subintervalos N y métodos numéricos.	122
3. a_k calculados con distintos métodos de integración.	126
4. Parámetros por defecto de <code>NIntegrate</code> en Mathematica 14.1 utilizados para el cálculo	130

Notación

Antes de adentrarnos en el desarrollo teórico y computacional de esta investigación, es conveniente presentar una tabla con la notación que será utilizada de forma recurrente a lo largo del documento. Esta notación abarca tanto variables matemáticas, parámetros físicos y métodos numéricos, como los acrónimos empleados para describir los sistemas cuánticos confinados analizados. La siguiente tabla tiene como objetivo facilitar la lectura y comprensión del texto, estandarizando los símbolos y referencias que intervienen en el estudio.

Cuadro 1: Notación utilizada en el documento

Símbolo	Descripción
N	Número de particiones (intervalos)
n	Nivel de energía
p	El integrando de la transformada de Dirac-Fourier
ER	Error relativo
k	Número de términos en la sumatoria del método CC y CCF
ω_k	Coficiente resultante de la integral en el método CCF
m	Grado del polinomio de Chebyshev (método Clenshaw–Curtis)
λ_j	Los pesos de la cuadratura
x_j	Los nodos de la cuadratura
PIAB	Partícula en una caja (Particle in a Box)
HOC	Oscilador armónico cuántico confinado (Harmonic Oscillator Confined)
TF	Transformada de Fourier
TDF	Transformada de Dirac-Fourier
CC	Método de Clenshaw–Curtis
CCF	Método de Clenshaw–Curtis–Filon
$S_{3/8}$ -F	Método de Simpson _{3/8} –Filon

En esta tabla se presentan las notaciones empleadas a lo largo del documento.

Cada símbolo representa un parámetro o método clave en el desarrollo del cálculo numérico de la transformada de Dirac-Fourier en sistemas cuánticos confinados (PIAB y HOC).

Introducción

*”Lo que observamos no es la naturaleza en sí misma,
sino la naturaleza expuesta a nuestro método de cuestionamiento.”*

— Werner Heisenberg

La mecánica cuántica es la teoría que describe el comportamiento de la materia y la energía a escala microscópica, proporcionando una descripción precisa de los sistemas físicos donde las leyes clásicas resultan insuficientes. Dentro de este marco, los sistemas cuánticos confinados unidimensionales, como la partícula en una caja y el oscilador armónico confinado, constituyen modelos fundamentales para entender fenómenos de confinamiento espacial y su influencia en las propiedades cuánticas de las partículas.

El estudio de estos sistemas no sólo es relevante por su interés teórico, sino también por sus aplicaciones prácticas en áreas como la física del estado sólido, la nanotecnología y la química cuántica, donde las dimensiones reducidas y los efectos de confinamiento alteran significativamente el comportamiento de las partículas. La función de onda, que representa el estado cuántico en el espacio de posición, puede transformarse al espacio de momento mediante la transformada de Dirac-Fourier (TDF), lo que permite analizar propiedades dinámicas y establecer relaciones esenciales entre las variables conjugadas de posición y momento.

Una motivación fundamental para el análisis en el espacio de momento proviene de las relaciones de incertidumbre, las cuales limitan la precisión con la que pueden conocerse simultáneamente las propiedades de posición y momento. Tra-

dicionalmente, estas relaciones se expresan mediante desviaciones estándar, como las asociadas a la posición y el momento; sin embargo, la entropía de Shannon [1, 2] emerge como una herramienta alternativa y más general para cuantificar la incertidumbre cuántica. Para acceder al espacio de momento es indispensable el uso de la transformada de Fourier aplicada a la función de onda en posición.

El cálculo exacto de la transformada de Fourier para sistemas cuánticos confinados presenta distintos niveles de dificultad. Un caso particular es el de la **partícula en una caja**, cuya transformada puede obtenerse de forma analítica gracias a la simplicidad de su función de onda. Sin embargo, otros sistemas como el **oscilador armónico cuántico confinado** no poseen soluciones analíticas cerradas para dicha transformada, lo cual complica notablemente su estudio. Esta dificultad se debe a la naturaleza oscilatoria y a la complejidad matemática del integrando.

Por ello, el desarrollo e implementación de métodos numéricos especializados, **elaborados de forma autónoma desde su base teórica hasta su implementación computacional**, resulta esencial. En este trabajo se abordan técnicas numéricas avanzadas, como Simpson_{3/8}-Filon, Clenshaw-Curtis y Clenshaw-Curtis-Filon, que optimizan la evaluación de estas integrales, mejorando significativamente la precisión en comparación con métodos comunes.

Además, se realiza un estudio detallado del comportamiento de las funciones de onda y sus respectivas transformadas para distintos niveles energéticos. Para ello, se emplean herramientas computacionales como **Fortran** y **Mathematica**, las cuales permiten implementar diversos métodos numéricos, así como visualizar y analizar los resultados obtenidos.

Cabe señalar que, si bien **Mathematica** ofrece una gran potencia mediante su rutina **NIntegrate**, esta funciona como una *caja negra*, ya que no proporciona información detallada sobre los algoritmos empleados internamente. En este sentido, uno de los objetivos principales de este trabajo es proponer alternativas

numéricas cuya metodología sea completamente transparente, facilitando así la reproducibilidad y comprensión del proceso de integración aplicado a funciones altamente oscilatorias.

Capítulo 1

Los inicios de la mecánica cuántica y los sistemas cuánticos confinados

”Si una persona dice que puede pensar en la mecánica cuántica sin sentirse mareado, eso solo demuestra que no la ha entendido.”

— Erwin Schrödinger

Este año, 2025, se conmemora el centenario del nacimiento de la mecánica cuántica, una de las teorías fundamentales de la física moderna. En reconocimiento a su profundo impacto científico y tecnológico, la UNESCO y las Naciones Unidas han declarado el 2025 como el **Año Internacional de las Ciencias y Tecnologías Cuánticas**. Esta celebración no solo rinde homenaje a los logros históricos de la mecánica cuántica, sino que también destaca su relevancia en el desarrollo actual de tecnologías emergentes como la computación cuántica, la criptografía cuántica y la metrología de precisión [3].

Antes de adentrarnos en el estudio específico de los sistemas cuánticos confinados, es importante reconocer el marco teórico del cual emergen. Esta tesis inicia con una breve revisión de los orígenes de la mecánica cuántica, no solo por razones históricas, sino porque las ideas que dieron lugar a esta disciplina transformaron

radicalmente nuestra comprensión de la naturaleza. Fueron necesarias décadas de descubrimientos conceptualmente desafiantes y experimentalmente innovadores para construir la base teórica sobre la cual hoy se desarrollan investigaciones como la presente. Es gracias a esas contribuciones fundamentales que resulta posible plantear, analizar y resolver los problemas abordados en este trabajo.

A principios del siglo XX, la física clásica llegó a un callejón sin salida: no podía dar cuenta de fenómenos que solo se manifestaban a escalas subatómicas. La radiación del cuerpo negro, el efecto fotoeléctrico, el espectro atómico del hidrógeno, o incluso la estabilidad de los átomos parecían desafiar los principios fundamentales de la mecánica de Newton y el electromagnetismo de Maxwell. Fue entonces cuando surgieron ideas revolucionarias que transformaron radicalmente nuestra comprensión de la naturaleza, dando lugar a lo que hoy se conoce como mecánica cuántica.

Todo comenzó con Max Planck en 1900, quien propuso que la energía de la radiación electromagnética no se emitía de manera continua, como se pensaba anteriormente, sino en paquetes discretos llamados cuantos. Esta idea, aunque inicialmente una solución matemática para ajustar los datos experimentales, fue el primer paso hacia una visión cuantizada de la naturaleza [4].

Cinco años más tarde, en 1905, Albert Einstein retomó y profundizó la propuesta de Planck para explicar el efecto fotoeléctrico, demostrando que la luz también puede comportarse como partículas individuales —los fotones— cada uno con una energía proporcional a su frecuencia. Esta fue una evidencia contundente de que la energía no solo está cuantizada, sino que también posee una naturaleza dual: ondulatoria y corpuscular [5].

En 1924, Louis de Broglie propuso que la dualidad onda-partícula, previamente asociada únicamente a la luz, también se extendía a la materia. En particular, postuló que partículas materiales como los electrones presentan un comportamien-

to ondulatorio, caracterizado por una longitud de onda asociada. Esta longitud de onda, conocida como longitud de onda de Debroglie, está dada por la expresión $\lambda = \frac{h}{p}$, donde h es la constante de Planck y p es el momento lineal de la partícula. Esta hipótesis fue confirmada experimentalmente en 1927 por Davisson y Germer, quienes observaron un patrón de difracción al hacer incidir un haz de electrones sobre un cristal de níquel [6, 7].

Con estas contribuciones, la mecánica cuántica comenzó a tomar forma. En 1926, Erwin Schrödinger desarrolló su ecuación de onda, que describe cómo evoluciona en el tiempo la función de onda $\psi(x, t)$ de un sistema cuántico. Esta ecuación no solo unificó los conceptos de onda y partícula, sino que también se convirtió en una herramienta fundamental para predecir el comportamiento de los sistemas físicos a escala microscópica [8].

1.1. La función de onda y la ecuación de Schrödinger

En el corazón de la mecánica cuántica se encuentra la función de onda, una entidad matemática que encapsula toda la información accesible sobre el estado físico de un sistema cuántico. A diferencia de la física clásica, donde el estado de una partícula queda completamente determinado por su posición y momento en un instante dado, la mecánica cuántica describe el estado de una partícula mediante una función $\psi(x, t)$, la cual, de acuerdo con la interpretación de Born, tiene un significado estadístico: su valor absoluto al cuadrado, $|\psi(x, t)|^2 dx$, representa la densidad de probabilidad de encontrar la partícula en la posición x en el tiempo t [9].

La función de onda puede depender de múltiples variables y configuraciones, y puede estar definida en espacios de más de una dimensión. Para sistemas de muchas partículas, la función de onda se extiende al espacio de configuración, haciendo de ella un objeto aún más complejo pero igualmente esencial. No obstante,

en todos los casos, ψ debe ser una función normalizable, es decir, debe cumplir con la condición:

$$\int |\psi(x, t)|^2 dx = 1, \quad (1.1)$$

lo cual garantiza que la probabilidad total de encontrar la partícula en todo el espacio sea igual a uno, en concordancia con la interpretación probabilística.

La dinámica de esta función está determinada por la ecuación de Schrödinger, formulada por Erwin Schrödinger en 1926 [8]. Esta ecuación constituye la piedra angular de la teoría cuántica, pues permite conocer cómo evoluciona el estado de un sistema a lo largo del tiempo. En su forma general, dependiente del tiempo, se expresa como:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(x, t), \quad (1.2)$$

donde \hbar es la constante de Planck reducida, $\psi(x, t)$ es la función de onda, y \hat{H} es el operador hamiltoniano, que representa la energía total del sistema (suma de la energía cinética y potencial). Esta ecuación es análoga a las leyes de Newton en la mecánica clásica, en el sentido de que gobierna la evolución temporal del sistema cuántico.

En muchos casos de interés físico, especialmente en sistemas donde el potencial no depende explícitamente del tiempo, se puede utilizar la forma estacionaria o independiente del tiempo de la ecuación de Schrödinger, que se plantea como un problema de autovalores:

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x), \quad (1.3)$$

donde E_n es la energía asociada al estado cuántico descrito por la función $\psi_n(x)$. Esta forma de la ecuación permite obtener los estados energéticos permitidos del sistema, así como las funciones de onda asociadas a cada uno de esos estados.

En general, el operador hamiltoniano en una dimensión toma la forma:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x), \quad (1.4)$$

donde el primer término corresponde a la energía cinética del sistema (representada mediante una derivada de segundo orden), y el segundo a la energía potencial que depende de la posición. Resolver esta ecuación significa encontrar las funciones de onda $\Psi_n(x)$ que satisfacen la ecuación diferencial dada un potencial $V(x)$ específico.

1.2. Sistemas cuánticos

Un sistema cuántico es cualquier entidad física cuya evolución está gobernada por las leyes de la mecánica cuántica. En este marco, el estado del sistema se describe completamente mediante una función de onda, la cual contiene toda la información observable sobre su comportamiento. Esta función permite calcular las probabilidades asociadas a distintos resultados de medición y describe cómo dichas probabilidades evolucionan en el tiempo, generalmente a través de la ecuación de Schrödinger.

En situaciones, un sistema cuántico no puede describirse mediante soluciones analíticas exactas. Por esta razón, se recurre al desarrollo de modelos ideales que permiten conceptualizar problemas de forma exacta, o bien al uso de técnicas de aproximación, tales como los métodos de perturbación, los métodos variacionales y los métodos numéricos. Estos enfoques resultan esenciales para el estudio de sistemas reales, los cuales suelen involucrar potenciales complejos, múltiples grados de libertad o condiciones de frontera específicas [10].

En décadas recientes, el avance en el control experimental de sistemas cuánticos ha permitido la manipulación precisa de estados individuales, especialmente en contextos como los circuitos superconductores, los átomos atrapados, los puntos cuánticos y los iones confinados. Estas plataformas no solo han abierto nuevas posibilidades tecnológicas, sino que también han planteado desafíos teóricos importantes. El estudio de estos sistemas requiere un tratamiento cuidadoso de las condiciones de confinamiento, las interacciones entre partículas y los efectos del entorno.

Este escenario ha motivado el desarrollo de marcos formales y herramientas de control orientados específicamente a sistemas cuánticos. Como se destaca en trabajos como el de Mabuchi y Khaneja [11], los principios del control clásico pueden adaptarse al ámbito cuántico, pero requieren una reconsideración profunda de las nociones de observabilidad, retroalimentación y estabilidad. Por su parte, enfoques recientes de aprendizaje automático aplicados al comportamiento dinámico de sistemas cuánticos —como los discutidos por Melnikov *et al.* [12]— han demostrado ser útiles para optimizar parámetros, predecir dinámicas complejas y explorar configuraciones experimentales.

Además, el estudio de sistemas abiertos —aquellos que interactúan con su entorno— ha revelado nuevos fenómenos asociados a la pérdida de coherencia, la aparición de efectos no markovianos y la necesidad de comprender la memoria cuántica en procesos de disipación. Estas características, abordadas por Breuer *et al.* [13], reflejan la complejidad inherente del mundo cuántico y subrayan la importancia de contar con marcos matemáticos y computacionales adecuados.

En la actualidad, el avance en el control experimental de sistemas cuánticos ha permitido la manipulación precisa de estados individuales en plataformas como los circuitos superconductores, los átomos atrapados, los puntos cuánticos y los iones confinados. Estos desarrollos no solo han abierto nuevas posibilidades tecnológicas, sino que también han planteado importantes desafíos teóricos, especialmente en lo relativo al tratamiento de las condiciones de frontera, las interacciones entre partículas y los efectos del entorno. En este contexto, cobran particular importancia los sistemas cuánticos confinados, en los cuales las partículas están restringidas a moverse dentro de límites espaciales o energéticos bien definidos. Este tipo de confinamiento da lugar a propiedades cuánticas específicas que no se manifiestan en sistemas extendidos, lo que convierte a los sistemas confinados en un área clave para el estudio detallado de fenómenos cuánticos y para el desarrollo de aplicaciones avanzadas en física y química cuántica. Estos sistemas serán abordados con mayor detalle en la siguiente sección.

1.2.1. Sistemas cuánticos confinados

Los sistemas cuánticos confinados son aquellos en los cuales las partículas están restringidas a moverse dentro de ciertos límites espaciales o energéticos. Este confinamiento puede ocurrir en una, dos o tres dimensiones y puede surgir de distintas condiciones físicas, como potenciales externos, paredes impenetrables o restricciones geométricas. En esta tesis, el enfoque estará centrado en sistemas unidimensionales.

El estudio de estos sistemas ha cobrado una atención creciente en las últimas décadas, no solo por su valor fundamental en la comprensión de la mecánica cuántica, sino también por sus numerosas aplicaciones tecnológicas. La restricción del movimiento modifica profundamente las propiedades físicas y químicas del sistema, alterando, por ejemplo, la distribución de densidad electrónica, los estados energéticos y la respuesta a campos externos.

Existen diversas formas de implementar el confinamiento. Entre las más comunes se encuentran los modelos de potenciales duros, como las paredes infinitas, y los potenciales suaves, que permiten cierta penetración de la función de onda. Un ejemplo destacado es el trabajo de Rodríguez-Bautista *et al.*, quienes aplicaron un enfoque tipo Roothaan para resolver las ecuaciones de Hartree-Fock en átomos confinados mediante paredes suaves. Su propuesta introduce una base con comportamiento asintótico correcto, lo que les permitió obtener resultados precisos incluso en sistemas multielectrónicos, superando las limitaciones asociadas al confinamiento por paredes rígidas [14].

Desde otra perspectiva, el análisis basado en medidas de teoría de la información ha revelado comportamientos no triviales en sistemas confinados. Salazar *et al.* estudiaron la entropía de Shannon en átomos hidrogenoides confinados y encontraron la aparición de puntos críticos que dependen del radio de confinamiento y de la intensidad del potencial. Utilizando distancias de Kullback-Leibler, demostraron cómo la densidad electrónica transita progresivamente desde un régimen influido por el potencial hacia uno que se asemeja al de una partícula en una caja, conforme el confinamiento se vuelve más estricto [15]. Recientemente, se ha

analizado el átomo de helio confinado en una cavidad esférica impenetrable mediante el método variacional de Ritz y medidas de información cuántica, como la entropía de Shannon y la información de Fisher, con el fin de estudiar los efectos del confinamiento sobre la distribución electrónica [16].

El oscilador armónico confinado constituye otro sistema modelo de gran interés. Montgomery *et al.* revisaron este sistema en dimensiones múltiples, obteniendo resultados de alta precisión para estados energéticos, momentos de transición y polarizabilidades dipolares. Su análisis detallado evidenció cómo la estructura energética del sistema varía con el radio de confinamiento, permitiendo estudiar las propiedades cuánticas en diferentes dimensiones, desde una hasta diez [17].

Cabe destacar que el interés en los sistemas cuánticos confinados no se limita al ámbito teórico. En años recientes, este campo ha cobrado una enorme relevancia tecnológica. Un caso emblemático es el de los puntos cuánticos, estructuras nanométricas en las que los electrones están confinados en las tres dimensiones del espacio, dando lugar a los estados energéticos discretos similares a los de un átomo. Estas propiedades han sido aprovechadas en aplicaciones como pantallas de alta definición, dispositivos fotovoltaicos y técnicas avanzadas de bioimagen. La importancia de estos sistemas fue reconocida en 2023 con el Premio Nobel de Química otorgado a Moungi G. Bawendi, Louis E. Brus y Alexei I. Ekimov por su descubrimiento y desarrollo de los puntos cuánticos [18]. Este galardón refleja no solo el impacto científico de los sistemas confinados, sino también su enorme potencial para revolucionar la tecnología moderna.

Hay diferentes sistemas con confinamiento. A continuación se describen dos sistemas, y quizás dos de los más populares: la partícula en una caja y el oscilador armónico cuántico confinado, que son los que se emplean en esta investigación.

Partícula en una caja

El sistema conocido como partícula en una caja, o pozo infinito, representa uno de los modelos más básicos y didácticos de la mecánica cuántica. Consiste en una partícula de masa m confinada entre dos barreras de potencial infinito que

delimitan el intervalo $x \in [-l, l]$. Dentro de esta región el potencial es nulo, por lo que la partícula se desplaza libremente en una dimensión [19].

Para formular el hamiltoniano del sistema, se parte de la forma explícita de la energía potencial. En este caso, no se adoptan unidades atómicas, de manera que la masa de la partícula se mantiene explícita en las expresiones. Así, la ecuación de Schrödinger dependiente de la posición toma la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (1.5)$$

donde $V(x) = 0$ para $x \in [-l, l]$ y $V(x) = \infty$ fuera de este intervalo.

$$\hat{H}^{\text{PIAB}}\psi_n(x) = -\frac{1}{2}\hat{p}^2\psi_n^{\text{PIAB}}(x) = E_n\psi_n^{\text{PIAB}}(x), \quad (1.6)$$

dado que el potencial está definido por tramos y es nulo dentro de la región de confinamiento, no aparece explícitamente en la ecuación anterior.

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } -l \leq x \leq l \\ \infty & \text{para } x < -l \text{ y } x > l \end{cases} \quad (1.7)$$

donde l representa la mitad del ancho de la caja de confinamiento. Debido a que la partícula no puede existir en las regiones donde el potencial es infinito, su función de onda se anula fuera del intervalo $[-l, l]$. Y sus funciones de onda están expresadas de la siguiente manera.

$$\psi_n^{\text{PIAB}}(x) = \sqrt{\frac{1}{l}} \sin\left(\frac{n(x+l)\pi}{2l}\right), \quad E_n = \frac{n^2\pi^2}{8ml^2} \quad (1.8)$$

donde $n = 1, 2, 3, \dots$ es el número cuántico principal, m es la masa de la partícula confinada en la caja.

En la Figura [1.1] se presentan las funciones de onda correspondientes a los primeros niveles energéticos del sistema de la partícula en una caja. Estas funciones fueron graficadas dentro del intervalo $[-1, 1]$, y exhiben el número característico de nodos que incrementa conforme aumenta n . La visualización de estas funciones permite observar claramente cómo la complejidad de las oscilaciones (cantidad de

nodos) aumenta con la energía del estado.

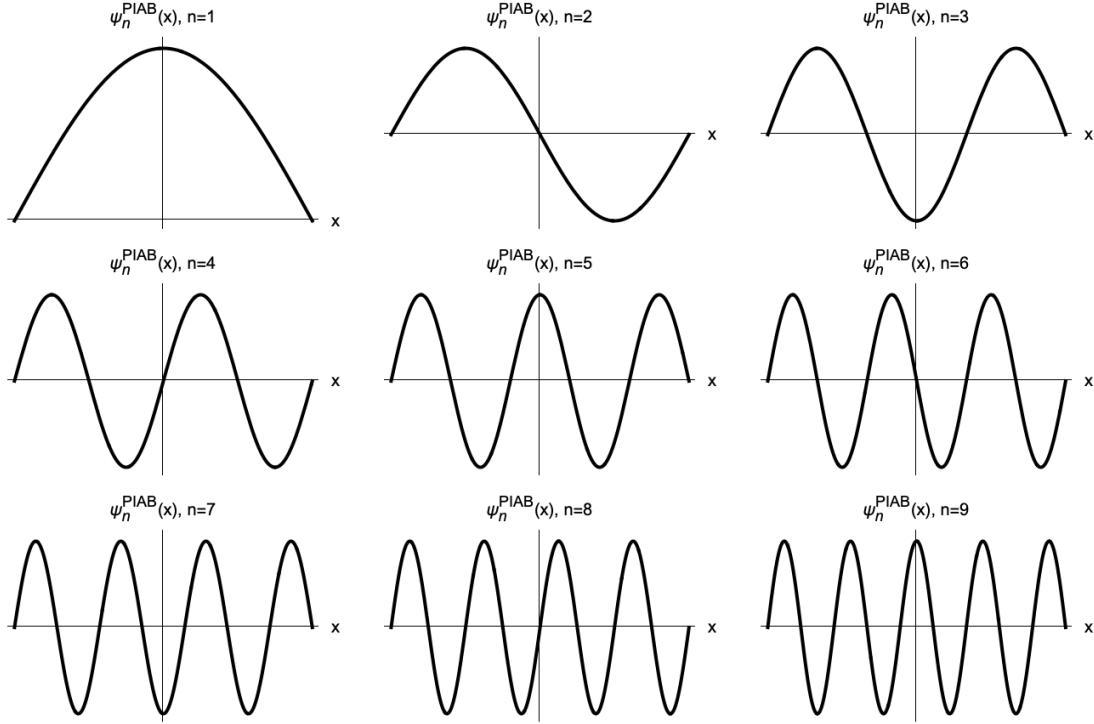


Figura 1.1: Funciones de onda correspondientes a los primeros niveles energéticos del sistema de la partícula en una caja en un intervalo $[-1, 1]$, para distintos valores del número cuántico principal n .

Este sistema, gracias a su simplicidad matemática y a la estructura precisa del modelo, se presenta como una herramienta accesible y poderosa para los investigadores. A lo largo de esta investigación, se demostrará cómo estas características lo hacen especialmente útil para el análisis y la resolución de desafíos específicos en este contexto.

Oscilador armónico confinado HOC

El oscilador armónico cuántico confinado en una dimensión consiste en un potencial armónico al que se le añaden dos paredes de potencial infinito que limitan el movimiento de la partícula dentro del intervalo $x \in [-l, l]$. Este modelo puede interpretarse como un sistema de pozo cuántico con una contribución armónica interna. En el trabajo de *H. Laguna* y *R. P. Sagar* [20] se analiza cómo el confinamiento modifica las propiedades del oscilador armónico libre, mostrando que el sistema presenta un comportamiento de transición: para confinamientos muy fuertes (caja pequeña), el sistema se asemeja a la partícula en una caja, mientras

que para confinamientos débiles (caja grande) recupera el comportamiento del oscilador armónico libre. De esta manera, el oscilador armónico confinado sirve como un puente entre ambos modelos cuánticos fundamentales.

En este trabajo se emplean unidades reducidas, donde $\hbar = m = 1$, por lo que el Hamiltoniano del oscilador armónico confinado en una dimensión se escribe como

$$\hat{H}^{\text{HOC}}\psi_n^{\text{HOC}}(x) = \left(-\frac{1}{2}\hat{p}^2 + V(x)\right)\psi_n^{\text{HOC}}(x) = E_n\psi_n^{\text{HOC}}(x) \quad (1.9)$$

donde

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}k_f x^2 & \text{para } -l \leq x \leq l \\ \infty & \text{para } x < -l \text{ y } x > l \end{cases}$$

y donde k_f se define como la frecuencia de oscilación: $k_f = \sqrt{m\omega_f/\hbar}$, donde ω_f es la frecuencia angular del oscilador.

Las siguientes funciones de onda son las soluciones analíticas correspondientes al Hamiltoniano del oscilador armónico cuántico confinado. Para los niveles con número cuántico n par, la función de onda tiene la forma:

$$\psi_n^{\text{HOC}}(x) = A_n e^{-\frac{1}{2}x^2} {}_1F_1\left(\frac{1}{4} - \frac{E_n}{2}, \frac{1}{2}, x^2\right), \quad (1.10)$$

mientras que para n impar es:

$$\psi_n^{\text{HOC}}(x) = B_n e^{-\frac{1}{2}x^2} {}_1F_1\left(\frac{3}{4} - \frac{E_n}{2}, \frac{3}{2}, x^2\right), \quad (1.11)$$

donde A_n y B_n son constantes de normalización, y ${}_1F_1(a, b, z)$ es la función confluente hipergeométrica de Kummer [21]. Los valores de E_n corresponden a los estados energéticos permitidos. Para obtener estos niveles, se fija un valor de confinamiento l ($l = 1$), y se resuelven numéricamente las siguientes ecuaciones:

$${}_1F_1\left(\frac{1}{4} - \frac{E_n}{2}, \frac{1}{2}, l^2\right) = 0, \quad {}_1F_1\left(\frac{3}{4} - \frac{E_n}{2}, \frac{3}{2}, l^2\right) = 0.$$

Es precisamente el papel de la función ${}_1F_1$ el que permite condicionar adecuadamente la forma funcional de la solución para que satisfaga imponiendo las condiciones a la frontera.

En la Figura 1.2, se muestran las funciones de onda $\psi_n^{\text{HOC}}(x)$ correspondientes a algunos de los primeros estados energéticos, ilustrando el comportamiento característico de este sistema confinado.

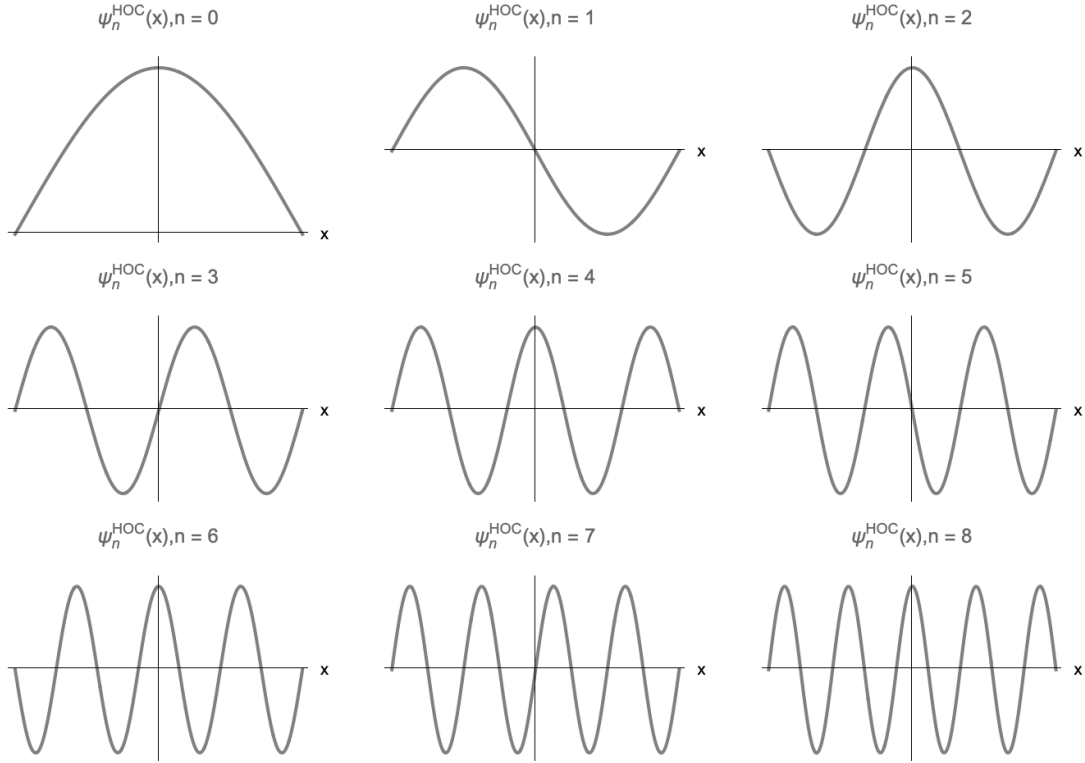


Figura 1.2: Funciones de onda correspondientes a los primeros niveles energéticos del sistema del HOC en un intervalo $[-1, 1]$, para distintos valores del número cuántico principal n .

Estos dos sistemas, la partícula en una caja y el oscilador armónico confinado, se estudiarán en profundidad debido a su relevancia como modelos base en mecánica cuántica. Ambos permiten analizar el efecto del confinamiento en sistemas físicos y químicos, y servirán como referencia para abordar problemas específicos en esta investigación.

Capítulo 2

Espacio de posición y momento, y relaciones de incertidumbres

”La verdadera tarea del científico es descubrir los límites del conocimiento y aceptar la incertidumbre como parte esencial de la naturaleza.”

— Lise Meitner

Una vez introducidos los principios fundamentales de la mecánica cuántica y los modelos básicos de sistemas confinados en el capítulo anterior, es necesario profundizar en dos de los conceptos más importantes en la descripción cuántica de una partícula: la posición y el momento. Estas variables no solo caracterizan el estado físico del sistema, sino que además están ligadas por una relación fundamental que expresa las limitaciones impuestas por la teoría cuántica en la precisión de su determinación simultánea. En este capítulo, se examinan las bases matemáticas y físicas que subyacen a estos operadores, así como las distintas formulaciones de las relaciones de incertidumbre que rigen su comportamiento. Estos conceptos no solo son esenciales en el entendimiento formal de la mecánica cuántica, sino que también tienen implicaciones directas en el estudio de los sistemas confinados que se analizarán en los capítulos posteriores.

2.1. Relación fundamental entre posición y momento

En mecánica cuántica, la posición y el momento están relacionados porque sus operadores no conmutan. Esta relación no es solo matemática, sino que refleja una limitación fundamental en la naturaleza de los sistemas cuánticos. A diferencia de la mecánica clásica, donde una partícula puede tener valores bien definidos de posición y momento simultáneamente, en el marco cuántico esto no es posible [22, 23].

La relación entre ambos surge del álgebra de operadores, donde el operador de posición se representa por $\hat{x} = x$ y el de momento por $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ en el espacio de posición. Estos operadores no conmutan, y su conmutador está dado por:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar. \quad (2.1)$$

Cuando el conmutador de dos operadores es cero, es decir, $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, los operadores comparten funciones propias, lo que significa que existe un conjunto de estados que son autoestados de ambos operadores simultáneamente. En cambio, si el conmutador no es cero, como ocurre con la posición y el momento $[\hat{x}, \hat{p}] \neq 0$, esto indica que los operadores no comparten funciones propias; no existe un conjunto de estados que sean simultáneamente autoestados de ambos. La no conmutatividad entre los operadores de posición y momento implica que no es posible determinar simultáneamente ambos valores con una precisión arbitraria. Esta propiedad no es solo una peculiaridad matemática, sino que refleja una limitación física fundamental: el conocimiento exacto de una de estas variables impone restricciones inevitables sobre la otra. Esta incompatibilidad entre posición y momento constituye la base formal del principio de incertidumbre de Heisenberg. En la sección siguiente, examinaremos dos diferentes relaciones de incertidumbre.

2.2. Relaciones de incertidumbre cuánticas

Los sistemas cuánticos confinados, como la partícula en una caja y el oscilador armónico confinado, proporcionan un marco fundamental para comprender el comportamiento de partículas en regiones espacialmente restringidas. Además de ilustrar la cuantización de la energía, estos modelos permiten analizar cómo el confinamiento modifica las propiedades cuánticas de las partículas. Uno de los aspectos más relevantes en este contexto es la relación de incertidumbre, formulada inicialmente por Heisenberg y generalizada por Kennard y Robertson [24, 25, 26, 27], la cual impone límites fundamentales en la precisión con la que se pueden medir simultáneamente ciertas propiedades, como la posición y el momento. En sistemas confinados, estas relaciones adquieren un carácter especial, ya que el confinamiento influyen directamente en la distribución de probabilidad de las variables dinámicas de la posición y del momento. A continuación, exploraremos en detalle las relaciones de incertidumbre cuánticas y su impacto en los sistemas confinados, analizando cómo el confinamiento afecta las desviaciones estándar de posición y momento, así como las medidas entrópicas de incertidumbre.

2.2.1. Principio de incertidumbre

El principio de incertidumbre es un concepto clave en la mecánica cuántica que describe las limitaciones fundamentales en la precisión con la que se pueden medir, al mismo tiempo, ciertas propiedades de una partícula. Estas propiedades corresponden a operadores que no conmutan, lo que refleja la naturaleza intrínseca de los sistemas cuánticos.

La relación de incertidumbre fue propuesta por Werner Heisenberg en 1927. Él relacionó esta limitación directamente con la no conmutatividad entre los operadores de posición (\hat{x}) y momento (\hat{p}). Si bien la formulación inicial de Heisenberg fue más conceptual (una estimación de orden de magnitud, $\Delta x \Delta p \approx h$), la fórmula matemática rigurosa que usa la desviación estándar para establecer la cota ($\frac{\hbar}{2}$) fue demostrada formalmente por Kennard (1928) [26]. Poco después, Robertson (1929) [27] generalizó el principio para que aplicara a *cualquier* par de operadores (\hat{A} y \hat{B}), probando que la incertidumbre es una consecuencia directa del valor

esperado de su conmutador. Al aplicar este formalismo al par conjugado (\hat{x}, \hat{p}) , se obtiene la desigualdad bien conocida:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (2.2)$$

donde Δx es la desviación estándar de la posición, Δp es la desviación estándar del momento, y \hbar es la constante de Planck reducida.

Las desviaciones estándar se calculan a partir del valor esperado de los operadores de posición y momento, y su cuadrado de dichos operadores. En el espacio de posición, el operador de posición \hat{x} se representa por x , mientras que el operador del momento \hat{p} se expresa como $-i\hbar \frac{d}{dx}$. Estas expresiones permiten calcular los valores esperados de posición y momento usando la función de onda representada en el espacio de posición.

Las fórmulas para las desviaciones estándar están dadas por:

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}, \quad \Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}. \quad (2.3)$$

En la práctica, cuando se usa la relación de Kennard-Robertson, basta con conocer la función de onda en el espacio de posición para calcular Δp . Esto se logra aplicando los operadores correspondientes y calculando los valores esperados $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p \rangle$ y $\langle p^2 \rangle$, como se muestra en las siguientes ecuaciones para un sistema confinado:

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-l}^l \psi_n(x)^* x^2 \psi_n(x) dx, \quad \langle x \rangle = \int_{-l}^l \psi_n(x)^* x \psi_n(x) dx. \quad (2.4)$$

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-l}^l \psi_n(x)^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right)^2 \psi_n(x) dx, \quad \langle p \rangle = \int_{-l}^l \psi_n(x)^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi_n(x) dx. \quad (2.5)$$

Aquí, $\psi_n(x)$ es la función de onda del sistema cuántico confinado.

2.2.2. Relaciones de incertidumbre entrópicas

Además de la relación de incertidumbre de Kennard-Robertson, que está basada en las desviaciones estándar de posición y momento, existen formulaciones alternativas que utilizan medidas de incertidumbre entrópicas. Estas formulaciones son conocidas como relaciones de incertidumbre entrópicas.

En 1975, Bialynicki-Birula y Mycielski [28] demostraron que las restricciones impuestas por la teoría cuántica sobre las distribuciones de probabilidad de variables conjugadas podían expresarse en términos de entropías de información. Ese mismo año, Beckner [29] estudió estas relaciones usando la transformada de Fourier. Más recientemente, Hertz [30] generalizó estas relaciones para incluir variables continuas, como posición x y momento p , y considerar correlaciones $x - p$. Estas relaciones incluyen, además, que el oscilador armónico libre en su estado basal corresponde a un estado de incertidumbre mínima.

Una de las relaciones entrópicas más utilizadas hoy en día es la basada en la suma de entropías de Shannon [2], la cual ha resultado especialmente útil para estudiar sistemas cuánticos confinados [31]. Esta relación establece lo siguiente:

$$S_t = S_x + S_p \geq D(1 + \ln \pi), \quad (2.6)$$

donde S_x y S_p representan las entropías de Shannon en el espacio de posición y momento, respectivamente, y D corresponde a la dimensionalidad del sistema, que en esta investigación es $D = 1$. Esta desigualdad establece que la incertidumbre total asociada a la posición y al momento de una partícula no puede ser menor que $1 + \ln \pi$.

Las entropías S_x y S_p se definen de la siguiente forma:

$$S_x = - \int_{-l}^l \rho_n(x) \ln \rho_n(x) dx, \quad S_p = - \int_{-\infty}^{\infty} \pi_n(p) \ln \pi_n(p) dp. \quad (2.7)$$

Aquí, $\rho_n(x)$ y $\pi_n(p)$ son las densidades de probabilidad en los espacios de posición y momento, respectivamente, definidas en términos de las funciones de onda. En el caso de los sistemas confinados considerados en este trabajo, $\rho_n(x)$

está definida en el intervalo finito $x \in [-1, 1]$, mientras que $\pi_n(p)$ se extiende sobre todo el eje, es decir, $p \in (-\infty, \infty)$:

$$\rho_n(x) = |\psi_n(x)|^2, \quad \pi_n(p) = |\Phi_n(p)|^2. \quad (2.8)$$

Sin embargo, si uno está usando la relación entrópica [2.6](#) se ocupa el valor esperado del logaritmo de la densidad en el espacio de posición, $\langle \ln \rho_n \rangle$, y el valor esperado del logaritmo de la densidad en el espacio de momentos, $\langle \ln \pi_n \rangle$.

Dado que no podemos definir un operador para la entropía de momentos en el espacio de posición para un sistema cuántico confinado, se recurre a transformar la función de onda en el espacio de posición al espacio de momentos mediante la transformada de Dirac-Fourier. Esta transformación permite calcular la función de onda en el espacio de momentos a partir de la función de onda en el espacio de posición. Por lo tanto, al utilizar la Transformada de Dirac-Fourier, es posible obtener la distribución en el espacio de momentos sin necesidad de definir un operador de entropía, permitiendo así el análisis entrópico en dicho espacio.

La función de onda en el espacio de momentos $\Phi(p)$ se tiene que determinar a través de la transformada de Dirac-Fourier de la función de onda en x , como se muestra en la ecuación [2.9](#):

$$\Phi_n(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-l}^l \psi_n(x) e^{-ipx/\hbar} dx. \quad (2.9)$$

En el capítulo siguiente se abordará con mayor detalle la transformada de Dirac-Fourier, herramienta clave para el análisis de funciones de onda en el espacio de momentos y para la evaluación precisa de medidas entrópicas de incertidumbre.

Capítulo 3

Transformada Fourier (Transformada de Dirac-Fourier)

*”La verdadera innovación ocurre cuando un problema
se transforma en una solución elegante.”*

— Grace Hopper

3.1. Transformada de Fourier (TF)

La transformada de Fourier es una herramienta matemática fundamental que permite descomponer una función en términos de sus componentes de frecuencia. Su uso es ampliamente extendido en diversas ramas de la física y la ingeniería, y resulta particularmente útil en el análisis de señales, procesamiento de imágenes, óptica y, de forma crucial, en la mecánica cuántica, donde establece una correspondencia entre las representaciones en posición y en momento de un sistema. Cabe destacar que aquí se presenta la transformada de Fourier en su forma general, es decir, sin hacer referencia a sistemas confinados específicos.

Matemáticamente, la transformada de Fourier de una función $f(x)$, definida para $x \in (-\infty, \infty)$ y bajo condiciones apropiadas de integrabilidad, se expresa como:

$$\mathcal{F}\{f(x)\} = g(z) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-2\pi izx} dx, \quad (3.1)$$

donde z representa la variable dual a x , asociada en muchos contextos físicos a la frecuencia espacial o al número de onda.

La TF posee propiedades matemáticas valiosas como la linealidad, simetría, y el teorema de Parseval, que vincula las normas L^2 de una función y su transformada. En física, la TF se interpreta frecuentemente como un cambio de base que permite analizar la función de onda en diferentes representaciones.

En mecánica cuántica, el caso más relevante es la transformada de Fourier aplicada a funciones de onda, donde la variable dual es el momento lineal p , y el cambio de base se realiza entre los estados $|x\rangle$ y $|p\rangle$. La relación entre las funciones de onda en ambos espacios es dada por una versión modificada de la TF, conocida como la *Transformada de Dirac-Fourier*, la cual incorpora la constante reducida de Planck \hbar como escala física.

El uso de la transformada de Fourier en mecánica cuántica es esencial para el estudio de las relaciones de incertidumbre de Heisenberg, ya que permite obtener la distribución de momento a partir de una función de onda en el espacio de posición, y viceversa. Este enfoque es ampliamente utilizado, por ejemplo, para examinar procesos dinámicos como la localización dinámica en el espacio de momento: un fenómeno donde la interferencia cuántica inhibe la difusión de paquetes de onda en dicho espacio [32]. Además, el análisis de paquetes de onda cuánticos no clásicos también se fundamenta en esta transformación [33]. En sistemas físicos confinados, como la partícula en una caja o el oscilador armónico confinado, la función de onda es distinta de cero únicamente dentro del intervalo de confinamiento y se anula fuera de él. Esto requiere adaptar la transformada de Fourier en un intervalo finito. Este punto será abordado en la siguiente sección mediante la llamada *Transformada de Dirac-Fourier*, la cual es una generalización formal de la TF en el formalismo de mecánica cuántica.

3.2. Transformada de Dirac-Fourier (TDF)

En el formalismo de la mecánica cuántica, el estado de una partícula puede representarse en diferentes bases. Dos de las más comunes son la base de posición $|x\rangle$ y la base de momento $|p\rangle$. La relación entre estas dos representaciones está dada por la *Transformada de Dirac-Fourier* (TDF), una extensión de la transformada de Fourier que se integra en el marco del espacio de Hilbert.

Dada una función de onda $\psi_n(x)$ en el espacio de posiciones, su representación en el espacio de momentos, denotada por $\Phi_n(p)$, se obtiene mediante:

$$\Phi_n(p) = \langle p|\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x) e^{-ipx/\hbar} dx. \quad (3.2)$$

Ambas están relacionadas por una transformación unitaria, que asegura la conservación de la norma del estado cuántico:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\Phi_n(p)|^2 dp. \quad (3.3)$$

Esta propiedad es una manifestación del *teorema de Parseval* en el contexto cuántico y refleja que ambas representaciones contienen la misma información física.

Además, esta transformación puede deducirse formalmente insertando la resolución de la identidad en el espacio de Hilbert:

$$\Phi_n(p) = \langle p|\psi_n\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle p|x\rangle \langle x|\psi_n\rangle dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x) e^{-ipx/\hbar} dx. \quad (3.4)$$

Su inversa permite recuperar la función de onda en posición a partir de su contraparte en momento:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_n(p) e^{ipx/\hbar} dp. \quad (3.5)$$

Estas expresiones establecen una correspondencia unitaria entre ambas representaciones. Esta transformación no solo permite estudiar el sistema desde diferentes perspectivas, sino que también facilita el análisis de propiedades físicas

como la distribución de momento o la evaluación de relaciones de incertidumbre en sistemas confinados [34].

3.2.1. Aplicación en sistemas cuánticos confinados

En sistemas ideales como la partícula libre o el oscilador armónico extendido, la integral de la TDF se evalúa en todo el espacio, ya que la función de onda está definida en todo el eje real. Sin embargo, en sistemas cuánticos confinados, como la partícula en una caja o el oscilador armónico confinado, la función $\psi_n(x)$ está definida únicamente en un intervalo finito $x \in [-l, l]$, y es nula fuera de este dominio.

En estos casos, la TDF se restringe al dominio del confinamiento como se muestra en la ecuación (2.9), lo cual convierte el problema en una *integral oscilatoria sobre un intervalo finito*. Estas integrales son numéricamente desafiantes, especialmente cuando p es grande, debido a la alta frecuencia del integrando.

3.2.2. Naturaleza oscilatoria del integrando

El integrando de la ecuación (2.9) presenta una oscilación rápida del tipo $e^{-ipx/\hbar}$, modulada por la forma funcional de la función de onda $\psi_n(x)$. Esta estructura oscilatoria introduce desafíos numéricos, en particular cuando p/\hbar adquiere valores grandes. En tales situaciones, los métodos de integración numérica convencionales —como las reglas de cuadratura de Newton-Cotes o Gauss— tienden a perder precisión, debido a que requieren resoluciones espaciales muy finas para captar adecuadamente el comportamiento de las oscilaciones.

Por esta razón, en este trabajo se implementan métodos especializados para integrales oscilatorias, como los métodos de tipo Filon o Clenshaw-Curtis, los cuales están diseñados para tratar de forma eficiente este tipo de integrandos. Estos métodos serán descritos con mayor detalle en el Capítulo 4, donde también se abordará su implementación computacional y su comparación en términos de precisión y eficiencia.

El integrando de la integral de la transformada de Dirac-Fourier

Existen diversos sistemas cuánticos cuyas funciones de onda poseen transformadas analíticas conocidas. Un ejemplo clásico es el sistema de la partícula en una caja, cuyo estado fundamental ($n = 1$), confinado en el intervalo $[-1, 1]$, está descrito por la función de onda que se presenta en la ecuación [3.6](#). La transformada de Dirac-Fourier (TDF) correspondiente a este estado se expresa analíticamente como:

$$\Phi_{PIAB}(p) = \frac{2\sqrt{2\pi} \cos(p)}{-4p^2 + \pi^2}. \quad (3.6)$$

El modelo de la partícula en una caja constituye un caso sencillo que permite estudiar de manera explícita el comportamiento del integrando en la transformada de Dirac-Fourier. Sin embargo, en sistemas cuánticos más complejos, como el oscilador armónico cuántico confinado, no siempre es posible obtener expresiones analíticas cerradas para la transformada. En tales situaciones, es necesario recurrir a técnicas numéricas para evaluar la integral que define la transformada.

Uno de los principales desafíos en el cálculo numérico de la transformada surge cuando el momento p adquiere valores elevados. Bajo estas condiciones, la función integrando exhibe un carácter altamente oscilatorio, lo que dificulta significativamente la evaluación precisa de la integral. Para ilustrar este fenómeno, se analiza el comportamiento del integrando en el caso de la partícula en una caja.

La Figura [3.1](#) muestra la función $\psi_1(x) \cos(px)$ para un valor bajo de momento, $p = 1$. En este escenario, la función es relativamente suave y carece de oscilaciones pronunciadas, facilitando la integración numérica.

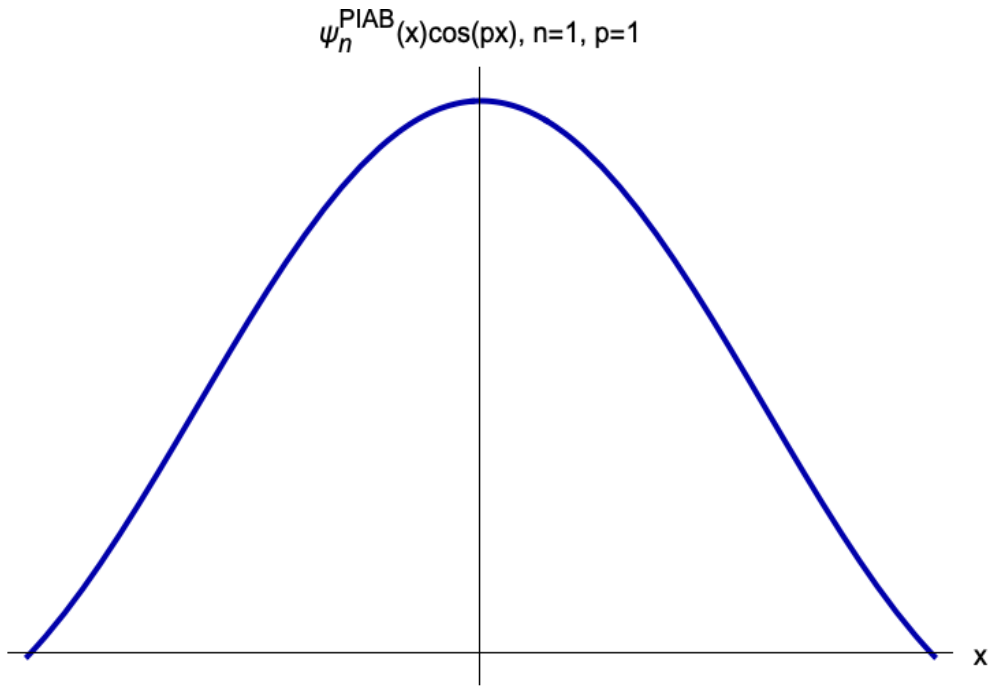


Figura 3.1: Funciones $\psi_1(x) \cos(px)$ del sistema PIAB en el estado fundamental para $p = 1$.

No obstante, al incrementar el valor de p , por ejemplo a $p = 80$, la función integrando presenta oscilaciones rápidas y de alta frecuencia dentro del intervalo de integración, como se observa en la Figura [3.2](#).

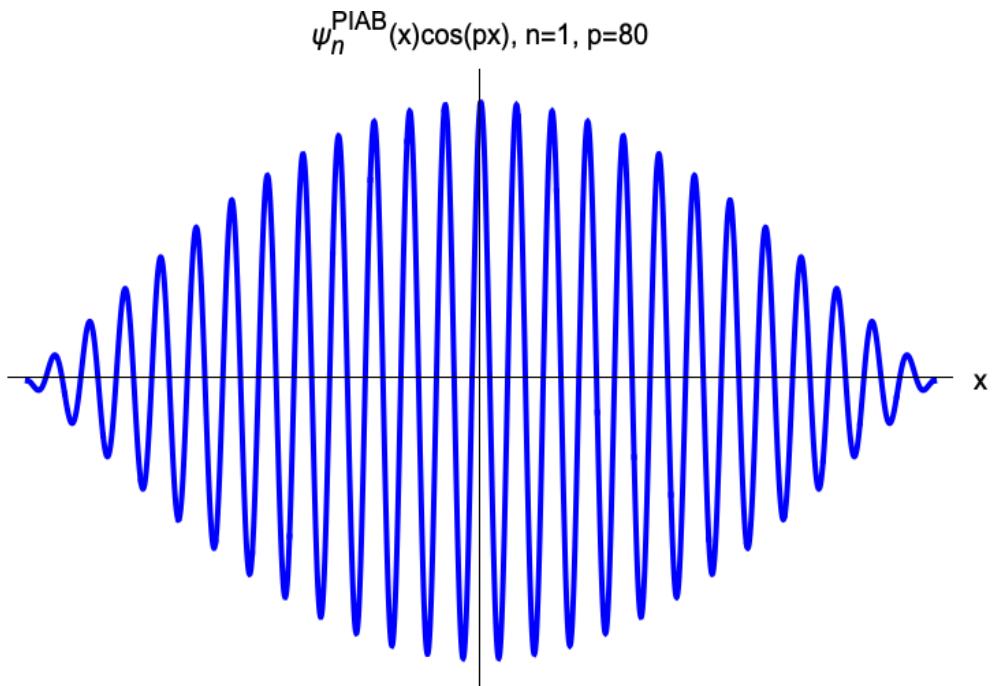


Figura 3.2: Funciones $\psi_1(x) \cos(px)$ del sistema PIAB en el estado fundamental para $p = 80$.

Se evidencia que el aumento en p conduce a una mayor frecuencia de oscilación del integrando, lo cual representa un desafío significativo para los métodos numéricos convencionales de integración [35, 36, 37], los cuales pueden perder precisión ante integrales con oscilaciones tan rápidas.

En particular, esta alta oscilación afecta la evaluación precisa de integrales definidas en intervalos extensos, como $(-\infty, \infty)$, implicadas en el cálculo de cantidades físicas tales como la suma entrópica. La imprecisión en las regiones de alta frecuencia (colas de la densidad $|\Phi_1(p)|^2$) puede conducir a errores que impactan la descripción correcta de la distribución en el espacio de momentos, afectando así el cálculo de propiedades relevantes como la dispersión y las relaciones de incertidumbre de p .

El presente trabajo se centra en el desarrollo y análisis de métodos numéricos robustos para evaluar integrales con integrandos altamente oscilatorios. Aunque el sistema PIAB sirve como un caso ilustrativo fundamental, posteriormente se abordará un sistema más complejo —el oscilador armónico cuántico confinado— donde la ausencia de soluciones analíticas para la transformada de la función en espacio de posición, hace indispensable el uso de técnicas numéricas eficientes y precisas.

En los siguientes capítulos, nos centraremos en el cálculo numérico de estas cantidades para sistemas cuánticos confinados en una dimensión. Por esta razón, en este trabajo se emplean métodos numéricos especializados en la evaluación de integrales oscilatorias, tales como los métodos tipo Filon y variantes adaptadas, que serán descritos con mayor detalle en el Capítulo 4.

3.3. Métodos de Newton-Cotes

Las fórmulas de cuadratura de Newton-Cotes constituyen una familia de métodos numéricos para la aproximación de integrales definidas, basados en la interpolación polinómica de la función integrando. En estos métodos, el intervalo de integración se divide en distintas regiones equiespaciadas, y la función $f(x)$ se interpola mediante un polinomio que pasa por un conjunto de puntos igualmente distribuidos en dicho intervalo. Posteriormente, se integra el polinomio resultante,

lo cual proporciona una estimación del valor de la integral original [38].

Formalmente, dados $m + 1$ nodos equiespaciados x_0, x_1, \dots, x_m en un intervalo $[a, b]$, se construye el polinomio interpolante de Lagrange $P_m(x)$ que interpola a $f(x)$ en esos puntos. La integral se aproxima entonces mediante:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b P_m(x) dx = \sum_{i=0}^m L_i(x) f(x_i) = \sum_{i=0}^m \lambda_i f(x_i),$$

donde los coeficientes λ_i se conocen como pesos de cuadratura.

En el presente trabajo nos enfocaremos exclusivamente en dos métodos representativos dentro de las fórmulas de cuadratura de Newton-Cotes: el método del trapecio y el método de Simpson_{3/8}. El método del trapecio, por su parte, es reconocido por su simplicidad y eficiencia al aproximar integrales mediante interpolación lineal, resultando adecuado para funciones con un comportamiento suave en el intervalo de integración. Además, su versión compuesta será empleada posteriormente en el método de Clenshaw-Curtis (CC) y Clenshaw-Curtis-Filon (CCF), que se explicará en secciones posteriores. Por otro lado, el método de Simpson_{3/8}, que utiliza un polinomio de interpolación cúbico, proporciona una mayor precisión al capturar mejor la curvatura de la función, especialmente en intervalos donde la función presenta variaciones más complejas.

3.3.1. Regla del Trapecio

La regla del trapecio de manera general, es un método de integración numérica que aproxima la integral de una función en un intervalo $[a, b]$ mediante la interpolación lineal entre los puntos extremos. Para un solo subintervalo con extremos $x_0 = a$ y $x_N = b$, la aproximación se expresa como:

$$I_{T_{\text{segmento}}}(f) = \frac{x_N - x_0}{2} [f(x_0) + f(x_N)]. \quad (3.7)$$

Para mejorar la precisión, se utiliza la regla del trapecio compuesto (regla cerrada), que divide el intervalo $[x_0, x_N]$ en N subintervalos de igual tamaño $h = \frac{x_N - x_0}{N}$, aplicando la regla del trapecio en cada subintervalo y sumando los resultados. Los

nodos se definen como $x_i = x_0 + ih$, por lo que la fórmula del trapecio compuesto queda entonces:

$$I_{TC}(f) = \frac{x_N - x_0}{2N} \left[f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) + f(x_N) \right] \quad (3.8)$$

3.3.2. Regla de Simpson_{3/8}

La regla de Simpson_{3/8} de manera general es un método de integración numérica que utiliza un polinomio de interpolación cúbico para aproximar la integral de una función en un intervalo $[x_0, x_N]$. Este método divide el intervalo en tres subintervalos iguales y ajusta un polinomio de tercer grado que interpola la función en cuatro puntos equidistantes, con $h = \frac{x_N - x_0}{3}$. La fórmula para un solo bloque es:

$$I_{S3/8\text{segmento}}(f) = \frac{x_N - x_0}{8} \left[f(x_0) + 3f\left(\frac{2x_0 - x_N}{3}\right) + 3f\left(\frac{x_0 - 2x_N}{3}\right) + f(x_N) \right] \quad (3.9)$$

donde los términos

$$\frac{2x_0 - x_N}{3}, \quad \frac{x_0 - 2x_N}{3},$$

representan los puntos intermedios empleados en la interpolación cúbica dentro del bloque. La aproximación compuesta, con nodos definidos como $x_i = x_0 + ih$, se expresa como:

$$I_{S3/8}(f) = \frac{x_N - x_0}{8N} \left[f(x_0) + 3 \sum_{i=1}^N f\left(\frac{2x_{i-1} - x_i}{3}\right) + 3 \sum_{i=1}^N f\left(\frac{x_{i-1} - 2x_i}{3}\right) + 2 \sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) + f(x_N) \right]. \quad (3.10)$$

Este método ofrece una mayor precisión que la regla del trapecio para funciones suficientemente suaves, debido a la mayor capacidad del polinomio cúbico para capturar la curvatura de la función.

Sin embargo, es importante destacar que estos métodos de Newton-Cotes no

son adecuados para la evaluación de integrales altamente oscilatorias, como las que aparecen en la Transformada de Dirac-Fourier cuando p es grande. En la siguiente sección, exploraremos métodos diseñados específicamente para abordar este tipo de integrales, los cuales permiten mejorar la precisión y estabilidad del cálculo numérico en estos casos.

3.4. Métodos enfocados con integrandos altamente oscilatorias

Las integrales altamente oscilatorias representan un desafío particular en el análisis numérico debido a la rápida variación del signo de la función integrando, lo cual puede causar inestabilidades y errores significativos en métodos de integración convencionales. Los métodos basados en interpolación polinómica presentan dificultades cuando se aplican a funciones oscilatorias, ya que requieren polinomios de alto grado para capturar adecuadamente su comportamiento, lo que puede afectar en la precisión del método. Para abordar esta dificultad, se han desarrollado métodos especializados que aprovechan la estructura oscilatoria del integrando para mejorar la precisión y eficiencia en el cálculo. Entre estos métodos, destacan el método de *Filon* y el método de *Clenshaw–Curtis*, los cuales son ampliamente reconocidos por su capacidad para manejar integrales con términos oscilatorios de alta frecuencia. En el presente trabajo, nos enfocaremos exclusivamente en estos dos métodos, dada su relevancia y efectividad en el contexto de integrales oscilatorias.

3.4.1. Método de Filon

El método de Filon, desarrollado en 1928 por Louis Napoleón George Filon [39], es una técnica diseñada para aproximar integrales altamente oscilatorias, como las que aparecen en las transformadas de Fourier. Estas integrales tienen la forma

$$\mathcal{I}_{\text{FT}}(f) = \int_{x_0}^{x_N} f(x) \cos(px) dx \quad \text{o} \quad \int_{x_0}^{x_N} f(x) \sin(px) dx, \quad (3.11)$$

donde p es un parámetro que puede inducir oscilaciones rápidas en el integrando.

La idea central del método consiste en aproximar $f(x)$ mediante interpolación lineal dentro de cada subintervalo $[x_0, x_N]$ y, en lugar de emplear los pesos constantes del trapecio clásico, calcular coeficientes λ_α y λ_β que dependen de p y del tipo de kernel (coseno o seno). Así, la cuadratura en un solo segmento se escribe como

$$\mathcal{I}_{\text{Fsegmento}}(f) = \lambda_\alpha^{c,s} f(x_0) + \lambda_\beta^{c,s} f(x_N). \quad (3.12)$$

Para obtener λ_α y λ_β , se imponen condiciones de exactitud para las funciones base $\{1, x\}$ multiplicadas por el kernel correspondiente. Esto conduce al sistema lineal:

$$\lambda_\alpha^{c,s} + \lambda_\beta^{c,s} = \int_{x_0}^{x_N} \cos(px) dx \quad \text{o} \quad \int_{x_0}^{x_N} \sin(px) dx, \quad (3.13)$$

$$\lambda_\alpha^{c,s} x_0 + \lambda_\beta^{c,s} x_N = \int_{x_0}^{x_N} x \cos(px) dx \quad \text{o} \quad \int_{x_0}^{x_N} x \sin(px) dx, \quad (3.14)$$

dependiendo del kernel elegido.

Coefficientes para el kernel coseno. Resolviendo el sistema para el caso de $\cos(px)$, se obtiene:

Para λ_α^c

$$\lambda_\alpha^c = \frac{\cos(px_0) - \cos(px_N) + px_0 \sin(px_0) - px_N \sin(px_N)}{p^2(x_0 - x_N)}$$

Para λ_β^c

$$\lambda_\beta^c = \frac{-\cos(px_0) + \cos(px_N) - px_0 \sin(px_0) + px_N \sin(px_N)}{p^2(x_0 - x_N)}$$

Coefficientes para el kernel seno. De manera análoga, para $\sin(px)$, los coeficientes son:

Para λ_α^s

$$\lambda_\alpha^s = \frac{-px_0 \cos(px_0) + px_N \cos(px_N) + \sin(px_0) - \sin(px_N)}{p^2(x_0 - x_N)}$$

Para λ_β^s

$$\lambda_\beta^s = \frac{px_0 \cos(px_0) - px_N \cos(px_N) - \sin(px_0) + \sin(px_N)}{p^2(x_0 - x_N)}$$

Para aplicar el método de Filon a todo el intervalo $[x_0, x_N]$, se divide éste en N subintervalos de igual tamaño $h = \frac{x_N - x_0}{N}$, donde $x_i = x_0 + ih$. En la fórmula simple, los coeficientes $\lambda_\alpha^{c,s}$ y $\lambda_\beta^{c,s}$ dependen de los extremos del subintervalo x_0 y x_N . Al considerar la cuadratura compuesta, estos extremos se reemplazan en cada subintervalo por x_{i-1} y x_i , y los coeficientes se calculan de manera análoga para cada segmento. De este modo, la cuadratura compuesta de Filon se expresa como

$$I_F(f) = \frac{x_N - x_0}{N} \left[\sum_{i=1}^N \lambda_{i-1}^{c,s} f(x_{i-1}) + \sum_{i=1}^N \lambda_i^{c,s} f(x_i) \right], \quad (3.15)$$

donde $\lambda_{i-1}^{c,s}$ y $\lambda_i^{c,s}$ son los coeficientes correspondientes al subintervalo $[x_{i-1}, x_i]$.

Una de las propiedades más destacadas del método de Filon es su eficacia frente a integrandos altamente oscilantes [40, 41, 42, 43]. A diferencia de los métodos clásicos de cuadratura, como los de Newton–Cotes, cuya precisión disminuye cuando la frecuencia del integrando aumenta, el método de Filon conserva —e incluso mejora— su exactitud a medida que el momento p crece. Esta característica lo convierte en una herramienta especialmente adecuada para evaluar integrales del tipo Fourier con alta eficiencia y menor costo computacional [21]. Para un desarrollo más detallado de estas cuadraturas, se remite al Apéndice, donde se presentan bajo la denominación trapecio-Filon, junto con los resultados obtenidos en esta investigación.

3.4.2. Método de Clenshaw–Curtis

El método de Clenshaw–Curtis es un esquema de integración numérica que se basa en la expansión del integrando en términos de polinomios de Chebyshev [44]. De manera equivalente, puede formularse mediante un cambio de variable $x = \cos(\theta)$, lo que permite representar la función integrando como una serie de coseno y utilizar una aproximación basada en la transformada discreta del coseno [21]. Este método destaca por su rápida convergencia, comparable a las reglas de cuadratura gaussiana, y porque conduce de forma natural a reglas de cuadratura anidadas, facilitando su uso en procesos adaptativos de integración.

Aplicando el cambio de variable, la integral definida en $[-1, 1]$ se transforma según:

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \int_0^\pi f(\cos \theta) \sin \theta d\theta, \quad (3.16)$$

de modo que el problema de integración se convierte en la evaluación ponderada de $f(\cos \theta)$. Esta función puede expresarse como una serie de cosenos:

$$f(\cos \theta) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} a_k \cos(k\theta). \quad (3.17)$$

Sustituyendo esta expansión en la integral se obtiene:

$$\int_0^\pi f(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \int_0^\pi \left[\frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} a_k \cos(k\theta) \right] \sin \theta d\theta, \quad (3.18)$$

el factor $\sin(\theta)$ en la integral transformada aparece como consecuencia del jacobiano del cambio de variable $x = \cos(\theta)$. Al aplicar esta transformación, se tiene $dx = -\sin(\theta) d\theta$, lo que introduce el término $\sin(\theta)$ en la nueva expresión de la integral:

$$= \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} a_k \int_0^\pi \cos(k\theta) \sin \theta d\theta. \quad (3.19)$$

La integral $\int_0^\pi \cos(k\theta) \sin \theta d\theta$ es nula cuando k es impar y, para k par, se cumple:

$$\int_0^\pi \cos(k\theta) \sin \theta d\theta = \frac{2}{1 - k^2}. \quad (3.20)$$

Por tanto, la integral original se aproxima mediante:

$$I_{CC} = a_0 + \sum_{k=1}^{\infty} a_{2k} \left(\frac{2}{1 - (2k)^2} \right) \quad (3.21)$$

donde los coeficientes a_k se calculan mediante:

$$a_k = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi f(\cos \theta) \cos(k\theta) d\theta, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.22)$$

En comparación con otros métodos de integración, como el método de Filon (especialmente diseñado para integrales oscilatorias) o las cuadraturas gaussianas clásicas, el método de Clenshaw–Curtis ofrece un equilibrio notable entre precisión y eficiencia computacional. Su rápida convergencia, combinada con la posibilidad de construir reglas anidadas y la estabilidad inherente de los polinomios de Chebyshev, lo convierten en una herramienta confiable y versátil para la evaluación numérica de integrales definidas.

De acuerdo con la Ecuación [3.22](#), en sistemas cuánticos confinados, la función de onda ψ_n aparece multiplicada directamente por el kernel oscilatorio, el cual adopta formas como $\cos(p \cos(\theta))$ o $\sin(p \cos(\theta))$, dependiendo del caso. Esta estructura es característica de los métodos basados en Clenshaw–Curtis. En esta investigación, los coeficientes a_k involucrados en dicha aproximación fueron calculados numéricamente mediante el método del trapecio compuesto, dada su simplicidad y eficacia para integrales definidas sobre intervalos finitos.

Capítulo 4

Plantamiento del problema

4.1. Objetivos

Objetivo general:

Adaptar, implementar y evaluar métodos numéricos avanzados para el cálculo preciso de la transformada de Dirac-Fourier en sistemas cuánticos confinados unidimensionales, específicamente en los modelos de partícula en una caja y oscilador armónico confinado, considerando distintos niveles energéticos.

4.1.1. Objetivos específicos

- Estudiar y analizar los fundamentos teóricos de los métodos numéricos de integración aplicados a integrales altamente oscilatorias, con énfasis en su aplicación a la transformada de Dirac-Fourier.
- Desarrollar y adaptar métodos numéricos como Simpson_{3/8}-Filon, Clenshaw-Curtis y Clenshaw-Curtis-Filon para optimizar el cálculo de la transformada en sistemas confinados unidimensionales. Cabe señalar que los métodos Simpson_{3/8}-Filon y Clenshaw-Curtis-Filon fueron desarrollados de manera autónoma, desde su fundamentación teórica hasta su implementación computacional.
- Evaluar el desempeño, precisión y estabilidad de los métodos implementados a través del análisis de errores relativos y su comparación con resultados

analíticos o de referencia.

- Analizar el efecto del nivel energético sobre el comportamiento numérico y la calidad de la integración en los sistemas PIAB y HOC.
- Validar la convergencia y estabilidad numérica de los métodos implementados en diferentes rangos de parámetros, como frecuencia oscilatoria p para el método de CCF.
- Utilizar herramientas computacionales como Fortran y Mathematica para el desarrollo, simulación y análisis de los métodos implementados.

4.2. Metodología

Como se ha discutido previamente, una característica del estudio de propiedades entrópicas en el espacio de momento es que no se puede definir un operador lineal asociado a la entropía de momento en el espacio de posición. Por esta razón, dicha entropía debe obtenerse a partir de la distribución en el espacio de momentos, a diferencia de otras cantidades como la desviación estándar del momento, que sí pueden calcularse mediante operadores bien definidos. Esta limitación obliga a trabajar directamente con la densidad de probabilidad en el espacio de momento, la cual se obtiene aplicando la transformada de Fourier a la función de onda en el espacio de posición. Sin embargo, este procedimiento introduce una nueva característica: si la transformada se evalúa de forma numérica y el momento p en el integrando de la transformada toma valores grandes, la función resultante se vuelve altamente oscilatoria. Esta oscilación complica significativamente su evaluación numérica, ya que muchos de los métodos estándar pierden precisión o fallan al tratar de integrar funciones con tal comportamiento.

En este trabajo abordaremos los problemas mencionados mediante la aplicación de distintos métodos de integración numérica, enfocados específicamente en el tratamiento de integrales altamente oscilatorias. El análisis se llevará a cabo en el contexto de dos sistemas cuánticos confinados fundamentales: la partícula

en una caja y el oscilador armónico confinado. Estos modelos no solo permiten estudiar el comportamiento cuántico bajo condiciones de confinamiento, sino que también proporcionan una base ideal para explorar las dificultades asociadas al cálculo numérico de la transformada de Fourier en situaciones reales.

Además, se discutirá cómo varía la complejidad computacional al considerar distintos estados excitados de cada sistema, ya que estos influyen directamente en el carácter oscilatorio de las funciones involucradas. La comparación entre los métodos aplicados permitirá evaluar su precisión y eficiencia en contextos donde el análisis analítico es inviable o insuficiente.

Estos sistemas fueron seleccionados debido a sus características particulares y a la relevancia que tienen en el estudio de sistemas cuánticos confinados. Por un lado, la partícula en una caja representa uno de los modelos unidimensionales más sencillos, y su principal ventaja radica en que su transformada de Dirac-Fourier puede obtenerse de manera analítica, lo cual permite contar con una referencia exacta para evaluar el desempeño de los métodos numéricos. Por otro lado, el oscilador armónico cuántico confinado no posee una solución analítica para la transformada, y es por eso que se convierte en un caso especialmente interesante para el análisis numérico.

Demostraremos que los métodos de integración numérica de Newton–Cotes resultan ineficientes al aplicarse a integrales altamente oscilatorias. Para ello, utilizaremos el método del trapecio compuesto, uno de los más conocidos de esta familia. En particular, se calculará la transformada de Dirac–Fourier del sistema de PIAB en su estado fundamental, variando el momento p , y fijando el número de particiones en $N = 50$.

La elección de $N = 50$ responde a una estrategia de compromiso entre precisión y costo computacional. Aunque una mayor cantidad de subintervalos, como $N = 100$, puede ofrecer mejoras en la precisión, estas no son significativamente superiores para este tipo de métodos en comparación con el aumento en el costo computacional, en la Figura [4.1](#) se muestra una comparación del error relativo para $N = 50$ y $N = 100$. Además, en los métodos que se introducirán más adelante,

$N = 50$ resulta suficiente para obtener resultados precisos, lo cual refuerza esta elección.

Posteriormente, se evaluará el logaritmo base 10 del error relativo con respecto al valor analítico, con el fin de identificar cuántas cifras significativas son reproducidas por el método. El error relativo se define como:

$$\text{Error relativo} = \left| \frac{I_{\text{num}} - I_{\text{ref}}}{I_{\text{ref}}} \right|, \quad (4.1)$$

donde I_{num} es el valor numérico obtenido mediante los métodos, e I_{ref} corresponde al valor de referencia. Para observar el orden de magnitud del error, se presenta $\log_{10}(\text{Error relativo})$.

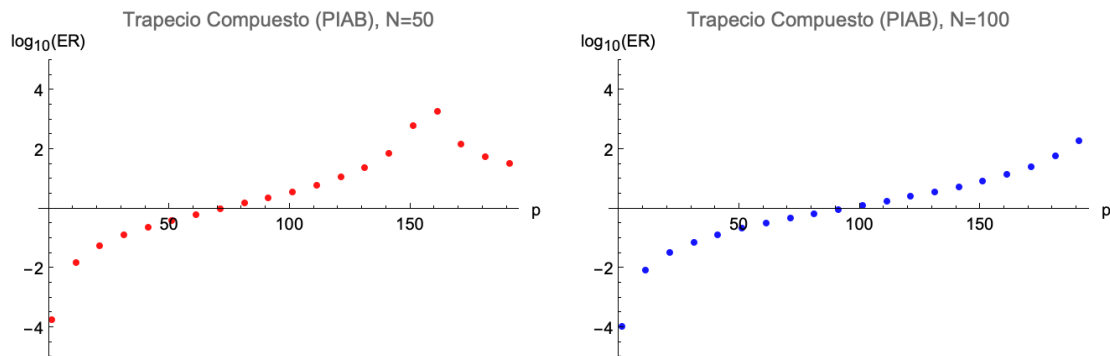


Figura 4.1: Gráficas de $\log_{10}(\text{Error relativo})$ en función del momento p , al aplicar el método del trapecio compuesto para el sistema PIAB en su estado fundamental. La gráfica de la izquierda corresponde a $N = 50$, mientras que la de la derecha a $N = 100$.

Como se observa en la Figura [4.1](#), para valores pequeños de p , el error relativo es bajo, reflejado en valores negativos de $\log_{10}(\text{Error relativo})$, lo que indica una buena aproximación numérica. Sin embargo, conforme p incrementa, el error relativo crece significativamente, alcanzando incluso valores positivos, lo cual evidencia una pérdida considerable de precisión. Este comportamiento indica que el método del trapecio compuesto pierde efectividad al aplicarse a integrales con funciones altamente oscilatorias.

Además, la comparación entre las dos curvas permite concluir que, aunque el uso de $N = 100$ mejora ligeramente la precisión para valores altos de p , la mejora no es proporcional al costo adicional requerido para duplicar el número de

particiones. Esto refuerza la decisión de utilizar $N = 50$ como base en los análisis posteriores.

Por esta razón, en este trabajo se desarrollaron métodos específicos para calcular la transformada de Dirac-Fourier en sistemas cuánticos confinados. Aunque algunos de sus nombres coincidan con técnicas existentes en la literatura [44, 45, 46]. La implementación de los métodos fue realizada desde el inicio; se formularon y programaron de manera autónoma con el objetivo de abordar el desafío que representan las integrales altamente oscilatorias y superar las limitaciones de los esquemas clásicos.

4.2.1. Métodos utilizados

Los métodos numéricos desarrollados e implementados en este trabajo fueron tres: Simpson_{3/8}-Filon ($S_{3/8}$ -F), Clenshaw-Curtis (CC) y Clenshaw-Curtis-Filon (CCF). Estos métodos fueron seleccionados debido a sus características particulares para tratar integrales con comportamiento altamente oscilatorio. En particular, el método Clenshaw-Curtis (CC) es ampliamente reconocido por su eficacia en este tipo de problemas; el método Simpson_{3/8}-Filon ($S_{3/8}$ -F) es su forma compuesta representa una combinación entre fórmulas clásicas de Newton-Cotes y técnicas especializadas en oscilaciones; mientras que el método Clenshaw-Curtis-Filon (CCF) combina ambos métodos.

Cabe mencionar que, además de estos, se exploraron otros métodos, cuyos detalles se presentan en el apéndice de esta tesis. Aunque algunos ofrecieron resultados aceptables, no alcanzaron la precisión ni el rendimiento de los métodos principales aquí descritos.

Los métodos numéricos desarrollados serán aplicados para calcular la transformada de Dirac-Fourier en dos sistemas cuánticos confinados unidimensionales: la partícula en una caja y el oscilador armónico confinado, considerando distintos niveles de excitación en cada caso.

Para entender la elección del kernel en las integrales, es importante recordar que la función exponencial compleja de la transformada de Dirac-Fourier puede expresarse en términos de senos y cosenos:

$$e^{-ipx} = \cos(px) - i \sin(px).$$

En el caso del sistema PIAB, las funciones propias presentan paridad alternante: el nivel de energía con número cuántico impar (n -impar) son funciones pares, mientras que los estados con n par son funciones impares, cuando el dominio es simétrico, como en este trabajo, donde se toma el intervalo $x \in [-1, 1]$.

Dado que las funciones onda de los sistemas estudiados son reales, es posible trabajar únicamente con la parte real o imaginaria de la transformada, según la paridad de la función de onda involucrada.

En particular, para el caso del sistema PIAB, definido sobre el intervalo simétrico $[-1, 1]$, las funciones propias presentan paridad alternante:

- Los estados con n impar son funciones pares (simétricas).
- Los estados con n par son funciones impares (antisimétricas).

Esta propiedad se debe a la función de onda del pozo cuántico, que alternan paridad en función del número cuántico n . Aprovechando esta característica, al momento de calcular la transformada de Fourier, se pueden eliminar los términos que se anulan por simetría:

- Para funciones pares (n impar), el término $\int_{-1}^1 \psi(x) \sin(px) dx$ se anula, por lo que se utiliza solo el kernel $\cos(px)$.
- Para funciones impares (n par), el término $\int_{-1}^1 \psi(x) \cos(px) dx$ se anula, y se usa únicamente $\sin(px)$.

En contraste, para el caso del HOC, su función de onda no exhibe una paridad definida en el intervalo de integración. Esto impide aprovechar una simetría clara para simplificar los cálculos, por lo que en este trabajo se utiliza únicamente el kernel $\cos(px)$ para todos los niveles de excitación.

A partir de estas consideraciones, se procede a describir detalladamente los métodos numéricos empleados. Cada técnica ha sido seleccionada en función de su capacidad para manejar integrales altamente oscilatorias y su eficacia frente a las características particulares del integrando. A continuación, se presenta el desarrollo y la implementación de los métodos utilizados en este trabajo.

Simpson_{3/8}-Filon (S_{3/8}-F)

El método Simpson_{3/8}-Filon de manera general es una técnica híbrida que combina la regla clásica de Simpson_{3/8} con la formulación de Filon, diseñada específicamente para evaluar integrales con comportamiento oscilatorio. El objetivo es aproximar integrales del tipo:

$$\int_a^b f(x) \sin(px) dx, \quad \text{o bien} \quad \int_a^b f(x) \cos(px) dx, \quad (4.2)$$

donde $f(x)$ representa la función de onda de sistemas cuánticos confinados multiplicada por el kernel. Para este método, $f(x)$ se interpola mediante un polinomio de Lagrange de grado 3 (Simpson_{3/8}), lo cual genera una fórmula de cuadratura de la forma:

$$I(f) \approx \sum_{j=0}^3 \lambda_j f(x_j), \quad (4.3)$$

donde los nodos x_j son equiespaciados y los pesos λ_j dependen explícitamente de la oscilación p . En esta formulación, la información del kernel oscilatorio se incorpora completamente en los pesos λ_j , permitiendo que el método mantenga una alta precisión incluso cuando p es grande.

Para construir la cuadratura, se consideran cuatro nodos equidistantes: los extremos del intervalo, x_0 y x_N , y dos puntos intermedios, $\frac{2x_0+x_N}{3}$, $\frac{x_0+2x_N}{3}$. Esta disposición de los nodos permite capturar de manera más eficiente la variación del integrando dentro del subintervalo.

La cuadratura resultante se expresa como:

$$I_{S3/8-Fsegmento}(f) = \lambda_0^{c,s} f(x_0) + \lambda_1^{c,s} f\left(\frac{2x_0 + x_N}{3}\right) + \lambda_2^{c,s} f\left(\frac{x_0 + 2x_N}{3}\right) + \lambda_3^{c,s} f(x_N), \quad (4.4)$$

donde los pesos $\lambda_j^{c,s}$ incorporan el efecto del término oscilatorio, como $\cos(px)$ o $\sin(px)$, dependiendo del kernel específico. Así que para comenzar resolveremos para $\cos(px)$.

Caso con kernel $\cos(px)$

Este problema puede plantearse a partir de la ecuación [4.2](#), imponiendo que la cuadratura sea exacta cuando la función integrando $f(x)$ corresponde a los polinomios base $1, x, x^2, x^3$. Estas condiciones permiten generar un sistema de ecuaciones lineales:

$$\begin{aligned} \lambda_0^c + \lambda_1^c + \lambda_2^c + \lambda_3^c &= \int_{x_0}^{x_N} \cos(px) dx, \\ \lambda_0^c x_0 + \lambda_1^c \left(\frac{2x_0 + x_N}{3}\right) + \lambda_2^c \left(\frac{x_0 + 2x_N}{3}\right) + \lambda_3^c x_N &= \int_{x_0}^{x_N} x \cos(px) dx, \\ \lambda_0^c x_0^2 + \lambda_1^c \left(\frac{2x_0 + x_N}{3}\right)^2 + \lambda_2^c \left(\frac{x_0 + 2x_N}{3}\right)^2 + \lambda_3^c x_N^2 &= \int_{x_0}^{x_N} x^2 \cos(px) dx, \\ \lambda_0^c x_0^3 + \lambda_1^c \left(\frac{2x_0 + x_N}{3}\right)^3 + \lambda_2^c \left(\frac{x_0 + 2x_N}{3}\right)^3 + \lambda_3^c x_N^3 &= \int_{x_0}^{x_N} x^3 \cos(px) dx. \end{aligned}$$

El resultado son expresiones explícitas para los pesos $\lambda_0^c, \lambda_1^c, \lambda_2^c$ y λ_3^c , que ahora dependen de p , como se muestran a continuación

Para λ_0^c

$$\begin{aligned}\lambda_0^c = & \frac{2p^3 x_0^3 \sin(px_0) - 2p^3 x_N^3 \sin(px_0) + 6p^3 x_0 x_N^2 \sin(px_0)}{2p^4 (x_0 - x_N)^3} \\ & - \frac{6p^3 x_0^2 x_N \sin(px_0) + 11p^2 x_0^2 \cos(px_0) - 2p^2 x_0^2 \cos(px_N)}{2p^4 (x_0 - x_N)^3} \\ & + \frac{11p^2 x_N^2 \cos(px_0) - 2p^2 x_N^2 \cos(px_N) - 22p^2 x_0 x_N \cos(px_0)}{2p^4 (x_0 - x_N)^3} \\ & + \frac{4p^2 x_0 x_N \cos(px_N) - 36px_0 \sin(px_0) - 18px_0 \sin(px_N)}{2p^4 (x_0 - x_N)^3} \\ & + \frac{36px_N \sin(px_0) + 18px_N \sin(px_N) - 54 \cos(px_0) + 54 \cos(px_N)}{2p^4 (x_0 - x_N)^3}\end{aligned}$$

Para λ_1^c

$$\begin{aligned}\lambda_1^c = & \frac{9(2p^2 x_0^2 \cos(px_0) - p^2 x_0^2 \cos(px_N) + 2p^2 x_N^2 \cos(px_0))}{2p^4 (x_0 - x_N)^3} \\ & - \frac{p^2 x_N^2 \cos(px_N) - 4p^2 x_0 x_N \cos(px_0) + 2p^2 x_0 x_N \cos(px_N)}{2p^4 (x_0 - x_N)^3} \\ & + \frac{10px_0 \sin(px_0) + 8px_0 \sin(px_N) + 10px_N \sin(px_0)}{2p^4 (x_0 - x_N)^3} \\ & + \frac{8px_N \sin(px_N) - 18 \cos(px_0) + 18 \cos(px_N)}{2p^4 (x_0 - x_N)^3}\end{aligned}$$

Para λ_2^c

$$\begin{aligned}\lambda_2^c = & - \frac{9(p^2 x_0^2 \cos(px_0) - 2p^2 x_0^2 \cos(px_N) + p^2 x_N^2 \cos(px_0))}{2p^4 (x_0 - x_N)^3} \\ & + \frac{p^2 x_N^2 \cos(px_N) - 2p^2 x_N^2 \cos(px_N) - 2p^2 x_0 x_N \cos(px_0)}{2p^4 (x_0 - x_N)^3} \\ & + \frac{4p^2 x_0 x_N \cos(px_N) - 8px_0 \sin(px_0) - 10px_0 \sin(px_N)}{2p^4 (x_0 - x_N)^3} \\ & + \frac{8px_N \sin(px_0) + 10px_N \sin(px_N) - 18 \cos(px_0) + 18 \cos(px_N)}{2p^4 (x_0 - x_N)^3}\end{aligned}$$

Para λ_3^c

$$\begin{aligned} \lambda_3^c = & -\frac{2p^3x_0^3\sin(px_N) - 2p^3x_N^3\sin(px_N) + 6p^3x_0x_N^2\sin(px_N)}{2p^4(x_0 - x_N)^3} \\ & + \frac{6p^3x_0^2x_N\sin(px_N) - 2p^2x_0^2\cos(px_0) + 11p^2x_0^2\cos(px_N)}{2p^4(x_0 - x_N)^3} \\ & - \frac{2p^2x_N^2\cos(px_0) + 11p^2x_N^2\cos(px_N) + 4p^2x_0x_N\cos(px_0)}{2p^4(x_0 - x_N)^3} \\ & - \frac{22p^2x_0x_N\cos(px_N) - 18px_0\sin(px_0) - 36px_0\sin(px_N)}{2p^4(x_0 - x_N)^3} \\ & + \frac{18px_N\sin(px_0) + 36px_N\sin(px_N) - 54\cos(px_0) + 54\cos(px_N)}{2p^4(x_0 - x_N)^3} \end{aligned}$$

Cuadratura compuesta

Si el intervalo $[x_0, x_N]$ se divide en N subintervalos uniformes de longitud $h = \frac{x_N - x_0}{N}$, donde $x_i = x_0 + ih$, entonces en cada subintervalo los nodos x_0 y x_N se reemplazan por x_{i-1} y x_i , como también en las $\lambda_0^c, \lambda_1^c, \lambda_2^c$ y λ_3^c ; y los términos x_0 y x_N se reemplazan por x_{i-1} y x_i . Esto da lugar a la fórmula compuesta de Simpson_{3/8}-Filon para el caso del coseno:

$$\begin{aligned} I_{S3/8F}(f) = & \frac{x_N - x_0}{N} \left[\sum_{i=1}^N \lambda_{i-1}^c f(x_{i-1}) + \sum_{i=1}^N \lambda_{i''}^c f\left(\frac{2x_{i-1} + x_i}{3}\right) \right. \\ & \left. + \sum_{i=1}^N \lambda_{i+1}^c f\left(\frac{x_{i-1} + 2x_i}{3}\right) + \sum_{i=1}^N \lambda_{i+2}^c f(x_i) \right]. \end{aligned}$$

Caso con kernel $\sin(px)$

Este problema también parte de la ecuación [4.2](#), imponiendo que la cuadratura sea exacta cuando la función integrando $f(x)$ corresponde a los polinomios base $1, x, x^2, x^3$. Estas condiciones permiten generar un sistema de ecuaciones lineales:

$$\begin{aligned} \lambda_0^s + \lambda_1^s + \lambda_2^s + \lambda_3^s &= \int_{x_0}^{x_N} \sin(px) dx, \\ \lambda_0^s x_0 + \lambda_1^s \left(\frac{2x_0 + x_N}{3}\right) + \lambda_2^s \left(\frac{x_0 + 2x_N}{3}\right) + \lambda_3^s x_N &= \int_{x_0}^{x_N} x \sin(px) dx, \end{aligned}$$

$$\lambda_0^s x_0^2 + \lambda_1^s \left(\frac{2x_0 + x_N}{3} \right)^2 + \lambda_2^s \left(\frac{x_0 + 2x_N}{3} \right)^2 + \lambda_3^s x_N^2 = \int_{x_0}^{x_N} x^2 \sin(px) dx,$$

$$\lambda_0^s x_0^3 + \lambda_1^s \left(\frac{2x_0 + x_N}{3} \right)^3 + \lambda_2^s \left(\frac{x_0 + 2x_N}{3} \right)^3 + \lambda_3^s x_N^3 = \int_{x_0}^{x_N} x^3 \sin(px) dx.$$

El sistema se resolvió con *Mathematica* y se obtuvieron expresiones explícitas para los pesos $\lambda_0^s, \lambda_1^s, \lambda_2^s$ y λ_3^s :

Para λ_0^s

$$\lambda_0^s = -\frac{-2p^3 x_0^3 \cos(px_0) + 2p^3 x_N^3 \cos(px_0) - 6p^3 x_0 x_N^2 \cos(px_0) + 6p^3 x_0^2 x_N \cos(px_0)}{2p^4 (x_0 - x_N)^3}$$

$$+ \frac{11p^2 x_0^2 \sin(px_0) - 2p^2 x_0^2 \sin(px_N) + 11p^2 x_N^2 \sin(px_0) - 2p^2 x_N^2 \sin(px_N)}{2p^4 (x_0 - x_N)^3}$$

$$+ \frac{-22p^2 x_0 x_N \sin(px_0) + 4p^2 x_0 x_N \sin(px_N) - 54 \sin(px_0) + 54 \sin(px_N)}{2p^4 (x_0 - x_N)^3}$$

$$+ \frac{36p x_0 \cos(px_0) + 18p x_0 \cos(px_N) - 36p x_N \cos(px_0) - 18p x_N \cos(px_N)}{2p^4 (x_0 - x_N)^3}$$

Para λ_1^s

$$\lambda_1^s = \frac{9(p^2 x_0^2 \sin(px_0) - 2p^2 x_0^2 \sin(px_N) + p^2 x_N^2 \sin(px_0) - 2p^2 x_N^2 \sin(px_N))}{2p^4 (x_0 - x_N)^3}$$

$$+ \frac{-2p^2 x_0 x_N \sin(px_0) + 4p^2 x_0 x_N \sin(px_N) - 18 \sin(px_0) + 18 \sin(px_N)}{2p^4 (x_0 - x_N)^3}$$

$$+ \frac{8p x_0 \cos(px_0) + 10p x_0 \cos(px_N) - 8p x_N \cos(px_0) - 10p x_N \cos(px_N)}{2p^4 (x_0 - x_N)^3}$$

Para λ_2^s

$$\lambda_2^s = -\frac{9(p^2x_0^2 \sin(px_0) - 2p^2x_0^2 \sin(px_N) + p^2x_N^2 \sin(px_0) - 2p^2x_N^2 \sin(px_N))}{2p^4(x_0 - x_N)^3} \\ - \frac{2p^2x_0x_N \sin(px_0) + 4p^2x_0x_N \sin(px_N) - 18 \sin(px_0) + 18 \sin(px_N)}{2p^4(x_0 - x_N)^3} \\ - \frac{8px_0 \cos(px_0) + 10px_0 \cos(px_N) - 8px_N \cos(px_0) - 10px_N \cos(px_N)}{2p^4(x_0 - x_N)^3}$$

Para λ_3^s

$$\lambda_3^s = -\frac{2p^3x_0^3 \cos(px_N) - 2p^3x_N^3 \cos(px_N) + 6p^3x_0x_N^2 \cos(px_N) - 6p^3x_0^2x_N \cos(px_N)}{2p^4(x_0 - x_N)^3} \\ - \frac{2p^2x_0^2 \sin(px_0) + 11p^2x_0^2 \sin(px_N) - 2p^2x_N^2 \sin(px_0) + 11p^2x_N^2 \sin(px_N)}{2p^4(x_0 - x_N)^3} \\ - \frac{4p^2x_0x_N \sin(px_0) - 22p^2x_0x_N \sin(px_N) + 54 \sin(px_0) - 54 \sin(px_N)}{2p^4(x_0 - x_N)^3} \\ - \frac{18px_0 \cos(px_0) - 36px_0 \cos(px_N) + 18px_N \cos(px_0) + 36px_N \cos(px_N)}{2p^4(x_0 - x_N)^3}.$$

Cuadratura compuesta

Si el intervalo $[x_0, x_N]$ se divide en N subintervalos uniformes de longitud $h = \frac{x_N - x_0}{N}$, donde $x_i = x_0 + ih$, entonces en cada subintervalo los nodos x_0 y x_N se reemplazan por x_{i-1} y x_i , como también en las $\lambda_0^c, \lambda_1^c, \lambda_2^c$ y λ_3^c ; y los términos x_0 y x_N se reemplazan por x_{i-1} y x_i . Esto da lugar a la fórmula compuesta de Simpson_{3/8}-Filon para el caso del seno:

$$I_{S3/8F}(f) = \frac{x_N - x_0}{N} \left[\sum_{i=1}^N \lambda_{i-1}^s f(x_{i-1}) + \sum_{i=1}^N \lambda_{i''}^s f\left(\frac{2x_{i-1} + x_i}{3}\right) \right. \\ \left. + \sum_{i=1}^N \lambda_{i+1}^s f\left(\frac{x_{i-1} + 2x_i}{3}\right) + \sum_{i=1}^N \lambda_{i+2}^s f(x_i) \right].$$

Clenshaw–Curtis–Filon (CCF)

El llamado método de Clenshaw–Curtis–Filon (CCF) aparece mencionado en diversos trabajos con ligeras variaciones en su enfoque y en su implementación. Por mencionar algunos ejemplos, el método de Clenshaw–Curtis–Filon es una técnica para calcular aproximaciones de integrales definidas, especialmente útil para funciones periódicas o altamente oscilatorias [47, 48], por lo que no existe una única versión universalmente aceptada bajo ese nombre. En este trabajo, se adopta una versión particular del método, que se desarrolla a través del esquema de Clenshaw–Curtis, en el cual el kernel oscilatorio vuelve a desempeñar un papel fundamental, y cuyo procedimiento se expone con detalle a continuación.

Lo que diferencia al método Clenshaw–Curtis–Filon (CCF) del método clásico de Clenshaw–Curtis (CC) es que, en el CCF, el *kernel* oscilatorio (por ejemplo, $\cos(p \cos \theta)$ o $\sin(p \cos \theta)$) se incorpora explícitamente en la integral que contiene $\cos(k\theta)$, como se muestra en la ecuación 3.20. Debido al cambio de variable $x = \cos \theta$, el *kernel* oscilatorio se transforma en $\cos(p \cos \theta)$ o $\sin(p \cos \theta)$, y aparece multiplicando a la función a integrar. En este caso, la integral toma la forma:

$$\int_0^\pi \cos(p \cos \theta) \cos(k\theta) \sin(\theta) d\theta \quad \text{o bien} \quad \int_0^\pi \sin(p \cos \theta) \cos(k\theta) \sin(\theta) d\theta, \quad (4.5)$$

y de modo que los coeficientes que antes eran constantes conocidos (como $2/(1 - k^2)$) ahora se reemplazan por factores dependientes tanto de p como de k que los llamaremos ω_k , los cuales se obtuvieron analíticamente utilizando el comando `Integrate` del software *Mathematica*

Caso con kernel $\cos(p \cos(\theta))$

A continuación se muestra la expresión para la cuadratura si usamos el kernel $\cos(p \cos(\theta))$

$$I_{CCFc} = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \int_0^{\pi} \cos(p \cos(\theta)) \cos(k\theta) \sin(\theta) d\theta;$$
$$a_k = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \psi(\cos(\theta)) \cos(k\theta) d\theta,$$

$$I_{CCFc} = \sum_{k=0}^{\infty} a_{2k} \omega_{2k}, \quad \omega_{2k} = \int_0^{\pi} \cos(p \cos(\theta)) \cos(k\theta) \sin(\theta) d\theta \quad (4.6)$$

Lo que genera expresiones diferentes que dependen del valor de ω_{2k} . Cabe destacar que estos coeficientes solo existen para índices pares, ya que los términos con k impar se anulan debido a la simetría. A continuación, se muestran las expresiones explícitas de los primeros coeficientes ω_{2k} :

Para ω_0

$$\omega_0 = \frac{2 \sin(p)}{p}$$

Para ω_2

$$\omega_2 = \frac{2(p^2 - 4) \sin(p) + 8p \cos(p)}{p^3}$$

Para ω_4

$$\omega_4 = \frac{32p(p^2 - 12) \cos(p) + 2(p^4 - 80p^2 + 192) \sin(p)}{p^5}$$

Para ω_6

$$\omega_6 = \frac{24p(3p^4 - 224p^2 + 1920) \cos(p)}{p^7} + \frac{2(p^6 - 420p^4 + 10368p^2 - 23040) \sin(p)}{p^7}$$

Para ω_{10}

$$\omega_{10} = \frac{40p(92897280 - 12902400p^2 + 384384p^4)}{p^{11}} \cos(p) - \frac{40p(3168p^6 - 5p^8)}{p^{11}} \cos(p) + \frac{2(-1857945600 + 877363200p^2 - 52416000p^4)}{p^{11}} \sin(p) + \frac{2(-823680p^6 + 3300p^8 - p^{10})}{p^{11}} \sin(p)$$

Para ω_{12}

$$\omega_{12} = \frac{96p(-20437401600 + 2941747200p^2 - 98703360p^4)}{p^{13}} \cos(p) + \frac{96p(1098240p^6 - 4004p^8 + 3p^{10})}{p^{13}} \cos(p) + \frac{2(980995276800 - 468202291200p^2 + 30005821440p^4)}{p^{13}} \sin(p) + \frac{2(-570286080p^6 + 3706560p^8 - 6864p^{10} + p^{12})}{p^{13}} \sin(p)$$

Para ω_{14}

$$\begin{aligned}\omega_{14} = & \frac{56p(25505877196800 - 3760481894400p^2 + 135908720640p^4)}{p^{15}} \cos(p) \\ & + \frac{56p(-1786060800p^6 + 9335040p^8 - 17472p^{10} + 7p^{12})}{p^{15}} \cos(p) \\ & + \frac{2(-714164561510400 + 343348346880000p^2)}{p^{15}} \sin(p) \\ & + \frac{2(-23032951603200p^4 + 490095083520p^6)}{p^{15}} \sin(p) \\ & - \frac{2(4063288320p^8 - 13069056p^{10} + 12740p^{12} - p^{14})}{p^{15}} \sin(p)\end{aligned}$$

Para ω_{16}

$$\begin{aligned}\omega_{16} = & \frac{512p(-2678117105664000 + 401717565849600p^2)}{p^{17}} \cos(p) \\ & - \frac{512p(15276957696000p^4 - 223278612480p^6)}{p^{17}} \cos(p) \\ & + \frac{512p(1432569600p^8 - 4031040p^{10} - 4284p^{12} + p^{14})}{p^{17}} \cos(p) \\ & + \frac{2(685597979049984000 - 331372356540825600p^2)}{p^{17}} \sin(p) \\ & + \frac{2(22955289477120000p^4 - 526467465216000p^6)}{p^{17}} \sin(p) \\ & - \frac{2(5060981882880p^8 - 21670871040p^{10})}{p^{17}} \sin(p) \\ & + \frac{2(38697984p^{12} - 21760p^{14} + 2p^{16})}{p^{17}} \sin(p)\end{aligned}$$

A medida que p aumenta, también lo hacen las magnitudes de los coeficientes ω_{2k} , lo que da lugar a expresiones algebraicamente más [46]. No obstante, al incrementar el número de términos en la suma, el método Clenshaw–Curtis–Filon (CCF) comienza a estabilizarse y a converger hacia un valor finito. Esta propiedad resulta especialmente útil, ya que permite truncar la suma en un número adecuado de términos para lograr una precisión aceptable sin comprometer sig-

nificativamente la eficiencia computacional. Las gráficas de los coeficientes ω_{2k} se presentan en el apéndice de esta tesis.

Caso con kernel $\sin(p \cos(\theta))$

La siguiente expresión corresponde a la cuadratura si usamos el kernel $\sin(p \cos(\theta))$

$$I_{CCFs} = \sum_{k=1}^{\infty} a_k \int_0^{\pi} \sin(p \cos(\theta)) \cos(k\theta) \sin(\theta) d\theta;$$

$$a_k = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \psi(\cos(\theta)) \cos(k\theta) d\theta,$$

la cuadratura sería:

$$I_{CCFs} = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \omega_i, \quad \omega_k = \int_0^{\pi} \sin(p \cos(\theta)) \cos(k\theta) \sin(\theta) d\theta. \quad (4.7)$$

Esto da lugar a expresiones distintas que dependen explícitamente del valor de ω_k . Es importante señalar que estos coeficientes sólo existen para índices impares, ya que los términos correspondientes a k par se anulan debido a la simetría del integrando. A continuación, se presentan las expresiones explícitas de los primeros coeficientes ω_k :

Para ω_1

$$\omega_1 = \frac{-2p \cos(p) + 2 \sin(p)}{p^2}$$

Para ω_3

$$\omega_3 = \frac{-2p(-24 + p^2) \cos(p) + 6(-8 + 3p^2) \sin(p)}{p^4}$$

Para ω_5

$$\omega_5 = \frac{1}{p^6} \left(-2p(1920 - 200p^2 + p^4) \cos(p) + 10(384 - 168p^2 + 5p^4) \sin(p) \right)$$

Para ω_7

$$\omega_7 = \frac{-1}{p^8} \left(2 \left(p(-322560 + 40320p^2 - 784p^4 + p^6) \cos(p) \right. \right. \\ \left. \left. + 7(46080 - 21120p^2 + 1008p^4 - 7p^6) \sin(p) \right) \right)$$

Para ω_9

$$\omega_9 = \frac{1}{p^{10}} \left(-2p(92897280 - 12579840p^2 + 342144p^4 - 2160p^6 + p^8) \cos(p) \right. \\ \left. + 54(3440640 - 1612800p^2 + 91520p^4 - 1232p^6 + 3p^8) \sin(p) \right)$$

Para ω_{11}

$$\omega_{11} = \frac{1}{p^{12}} \left(-2p(-40874803200 + 5790597120p^2 - 184504320p^4 \right. \\ \left. + 1812096p^6 - 4840p^8 + p^{10}) \cos(p) \right. \\ \left. + 22(-3715891200 + 1765048320p^2 - 109670400p^4 + 1921920p^6 \right. \\ \left. - 10296p^8 + 11p^{10}) \sin(p) \right)$$

Para ω_{13}

$$\begin{aligned}\omega_{13} = & \frac{1}{p^{14}} \left(-2p(25505877196800 - 3719607091200p^2) \cos(p) \right. \\ & + 2p(130025226240p^4 - 1588654080p^6) \cos(p) \\ & - 2p(7138560p^8 - 9464p^{10} + p^{12}) \cos(p) \\ & + 26(1961990553600 - 940120473600p^2) \sin(p) \\ & - 26(61776691200p^4 - 1250242560p^6) \sin(p) \\ & \left. + 26(9335040p^8 - 24024p^{10} + 13p^{12}) \sin(p) \right)\end{aligned}$$

Para ω_{15}

$$\begin{aligned}\omega_{15} = & \frac{1}{p^{16}} \left(-2p(-21424936845312000 + 3188234649600000p^2) \cos(p) \right. \\ & - 2p(118455179673600p^4 - 1650320179200p^6) \cos(p) \\ & + 2p(9674496000p^8 - 22913280p^{10}) \cos(p) \\ & - 2p(16800p^{12} - p^{14}) \cos(p) \\ & + 30(-1428329123020800 + 688658684313600p^2) \sin(p) \\ & - 30(47006023680000p^4 - 1041966858240p^6) \sin(p) \\ & + 30(9376819200p^8 - 35473152p^{10}) \sin(p) \\ & \left. - 30(49504p^{12} - 15p^{14}) \sin(p) \right)\end{aligned}$$

Del mismo modo que con los coeficientes ω_{2k} , al incrementar el valor de p , los coeficientes ω_k también aumentan en magnitud, generando términos cada vez más grandes en la expansión. No obstante, al considerar un número suficientemente grande de términos en la serie, el método Clenshaw–Curtis–Filon (CCF) muestra una tendencia clara hacia la convergencia. Esta propiedad permite truncar adecuadamente la expansión sin perder precisión significativa, lo cual resulta fundamental para mantener la eficiencia computacional del método. Las gráficas de los coeficientes ω_k se presentan en el apéndice de esta tesis.

Este enfoque está respaldado por trabajos anteriores que usan una estrategia

similar. Específicamente, el artículo de **Piessens y Branders** (1975) [46], un estudio importante para calcular integrales oscilatorias, presentó unos valores clave que llamaron *momentos oscilatorios*. Ellos usaron estos momentos para reescribir la integral con polinomios de Chebyshev.

La parte crucial es que estos momentos oscilatorios cumplen exactamente la misma función que nuestros coeficientes ω_k en el método CCF. Esta similitud demuestra que la idea central de nuestro trabajo se basa en técnicas que han funcionado por décadas.

La única diferencia es el procedimiento de cálculo: Piessens y Branders obtuvieron sus momentos mediante *fórmulas de recurrencia*, mientras que en esta tesis nuestros coeficientes ω_k se obtuvieron *resolviendo una integral de forma analítica*. Sin embargo, el hecho de que ambos enfoques lleguen al mismo objetivo funcional confirma la validez de nuestra propuesta.

En la Tabla 4.1, se presenta un resumen de las principales características de los métodos de cuadratura empleados en este trabajo. Esta comparación destaca aspectos clave como el tratamiento del kernel oscilatorio y la estructura de los coeficientes utilizados en cada técnica.

Cuadro 4.1: Características principales de los métodos numéricos empleados

Método	Características
Trapezio compuesto (Newton-Cotes)	El kernel oscilatorio está incluido dentro de la función integrada.
Simpson _{3/8} -Filon (Newton-Cotes-Filon)	El kernel oscilatorio se separa de la función integrada y se incorpora en los pesos de la cuadratura.
Clenshaw-Curtis (CC)	El kernel oscilatorio se mantiene dentro de los integrales que definen los coeficientes a_k .
Clenshaw-Curtis-Filon (CCF)	El kernel oscilatorio se separa de los coeficientes a_k y está incorporado en los coeficientes ω_{2k} .

Cabe destacar que los coeficientes a_k en los métodos de Clenshaw–Curtis (CC) y Clenshaw–Curtis–Filon (CCF) presentan integrandos con factores del tipo $\cos(k\theta)$. Esta estructura produce un comportamiento crecientemente oscilatorio conforme aumenta el índice k , lo que exige una mayor precisión en la integración numérica de dichos términos. Esto se evidencia y se analiza con más detalle en uno de los apéndices de esta tesis.

4.2.2. Implementación computacional de los métodos

La implementación computacional de los métodos numéricos presentados en este trabajo se realizó utilizando dos herramientas principales: el lenguaje de programación `Fortran` y el software *Mathematica* [49]. La mayor parte del desarrollo fue implementada en `Fortran`, donde los algoritmos fueron formulados e implementados de forma autónoma, permitiendo un control detallado de la estructura numérica y eficiencia en el tratamiento de integrales oscilatorias. *Mathematica* se utilizó como apoyo simbólico y algebraico, particularmente en la resolución de sistemas de ecuaciones lineales asociados al método de Simpson_{3/8}–Filon, empleando la función `Solve`. En el cálculo de coeficientes ω_k necesarios en la formulación del método Clenshaw–Curtis–Filon. También se empleó para verificar los resultados obtenidos con `Fortran`, al comparar los valores numéricos con los generados mediante la rutina `NIntegrate`.

Todos los códigos desarrollados se incluyen íntegramente en el apéndice de esta tesis, a fin de garantizar reproducibilidad de los resultados.

Los métodos de integración fueron implementados utilizando doble precisión (`real*8`) para mejorar la exactitud de los cálculos. En el caso del método Simpson_{3/8}–Filon compuesto, se fijó el número de subintervalos en $N = 50$, logrando un balance adecuado entre precisión y costo computacional. En el apéndice de esta tesis se incluye una comparación adicional utilizando $N = 100$ y considerando los primeros estados excitados de ambos sistemas estudiados, con el objetivo de evidenciar las diferencias en precisión y comportamiento numérico en distintos

regímenes.

El método de Clenshaw–Curtis (CC) fue desarrollado y programado desde cero. Las integrales para calcular a_k se evaluaron numéricamente mediante la regla del trapecio compuesta, también con $N = 50$. La expansión de la función fue truncada en los coeficientes a_k y a_{2k} hasta $k = 10$, lo cual resultó suficiente para alcanzar la convergencia esperada.

Para el método Clenshaw–Curtis–Filon (CCF), se mantuvo $N = 50$ y se fijaron $\omega_k = 10$. Los coeficientes involucrados se calcularon exclusivamente en *Mathematica*, utilizando `Integrate` para obtener sus expresiones analíticas. Por otro lado, las integrales necesarias en el método para el cálculo de los a_k , fueron evaluadas numéricamente mediante la regla del trapecio compuesta, también hasta $k = 10$, lo cual resultó suficiente para alcanzar la convergencia esperada.

La calidad de los resultados fue evaluada a través del logaritmo base 10 del error relativo (ER) en función de p . Para el sistema de la partícula en una caja, se utilizó una expresión analítica conocida como referencia.

En cambio, para el sistema del oscilador armónico cuántico confinado, donde no se dispone de una solución exacta, se tomó como valor de referencia el resultado obtenido con `NIntegrate`, utilizando las opciones `WorkingPrecision` \rightarrow 24, `PrecisionGoal` \rightarrow 12 y `AccuracyGoal` \rightarrow 12.

La función `NIntegrate` de Mathematica [49] fue utilizada en distintos momentos a lo largo de esta investigación, tanto como referencia para el cálculo de integrales como en el análisis comparativo entre métodos numéricos. La Tabla 4.2 resume los principales contextos en los que se aplicó dicha herramienta. Esto se puede ver más a detalle en el apéndice.

Uso de NIntegrate	Descripción
1	Se utilizó como solución numérica de referencia para el cálculo del oscilador armónico cuántico confinado. A partir de este resultado se obtuvo el logaritmo del error relativo comparando con los métodos numéricos propuestos.
2	Se aplicó en la variante 3 del método Clenshaw–Curtis–Filon para calcular los coeficientes a_k y ω_k , y así comparar con las variantes 1 y 2, utilizando el sistema PIAB.
3	En el apéndice, se empleó NIntegrate para calcular los coeficientes a_k y ω_k en el método de CCF, tanto para la partícula en una caja como para el oscilador armónico cuántico confinado.

Cuadro 4.2: Principales usos de la función NIntegrate en el desarrollo de esta investigación.

Capítulo 5

Resultados

Se desarrollaron e implementaron distintos métodos de integración numérica para calcular la transformada de Dirac-Fourier. Los métodos empleados fueron: *Simpson_{3/8}-Filon* ($S_{3/8}$ -F), *Clenshaw-Curtis* y *Clenshaw-Curtis-Filon*. Estos esquemas se aplicaron a dos sistemas cuánticos representativos: la partícula en una caja y el oscilador armónico confinado, considerando tanto el estado fundamental como diversos estados excitados en cada caso.

A continuación, se presenta el análisis correspondiente al sistema PIAB.

5.1. Métodos aplicados a la partícula en una caja

En esta sección se presentan los resultados obtenidos al aplicar los métodos numéricos descritos en capítulos anteriores al sistema cuántico de PIAB. Este modelo constituye un caso fundamental en mecánica cuántica, no solo por su simplicidad matemática, sino también por su valor como punto de partida para comprender fenómenos de confinamiento cuántico más complejos. Además, su carácter resoluble permite contar con soluciones analíticas para la función en el espacio de momentos.

Se consideraron tanto el estado fundamental del sistema como varios estados excitados. Como es bien sabido, el estado basal corresponde al número cuántico $n = 1$, mientras que los estados excitados se asocian con valores enteros mayores de

n . La forma de la función de onda varía con cada nivel de energía y, en el dominio espacial definido entre $[-1, 1]$, como lo vimos en la ecuación [1.8](#). Esta expresión representa una función oscilatoria cuyo número de nodos depende directamente del valor de n . La frecuencia de oscilación de la función de onda aumenta conforme se incrementa el nivel de energía, lo que plantea mayores exigencias a los métodos de integración numérica.

Para calcular la transformada de Dirac-Fourier de estas funciones, es necesario tener en cuenta la paridad del número cuántico n , ya que esta determina si se evalúa la parte seno o coseno de la transformada. Esto se debe a las propiedades de simetría de la función de onda respecto al origen:

- **Para valores impares de n** , la función de onda es par respecto al centro del intervalo, por lo que se evalúa la parte **coseno** de la transformada de Fourier, con solución analítica:

$$\phi_n(p) = \frac{2n\sqrt{2\pi} \cos(p)}{-4p^2 + n^2\pi^2} \quad (5.1)$$

- **Para valores pares de n** , la función de onda es impar respecto al origen, por lo que se evalúa la parte **seno** de la transformada, con solución analítica:

$$\phi_n(p) = \frac{2n\sqrt{2\pi} \sin(p)}{-4p^2 + n^2\pi^2} \quad (5.2)$$

Estas expresiones exactas permiten comparar directamente los resultados obtenidos mediante los métodos numéricos implementados, y así evaluar la precisión y estabilidad de cada esquema ante diferentes condiciones, como el nivel de energía n o la frecuencia p involucrada en la transformada.

5.1.1. Análisis del estado basal PIAB ($n = 1$)

Se inicia el análisis numérico con el estado fundamental del sistema PIAB, correspondiente al número cuántico $n = 1$. En este caso, la función de onda

presenta una sola oscilación en el intervalo $x \in [-1, 1]$, lo que implica una menor complejidad en el comportamiento del integrando, en comparación con los estados excitados.

Dado que $n = 1$ es impar, se evalúa únicamente la parte coseno de la transformada de Dirac-Fourier, cuya expresión y solución analítica han sido descritas previamente. Este caso representa un punto de partida ideal para verificar la correcta implementación de los métodos numéricos y evaluar su precisión con un integrando de baja frecuencia.

A continuación, se presentan los resultados obtenidos para diferentes valores de p , comparando el desempeño de los métodos *Simpson_{3/8}-Filon compuesto*, *Clenshaw-Curtis* y *Clenshaw-Curtis-Filon*.

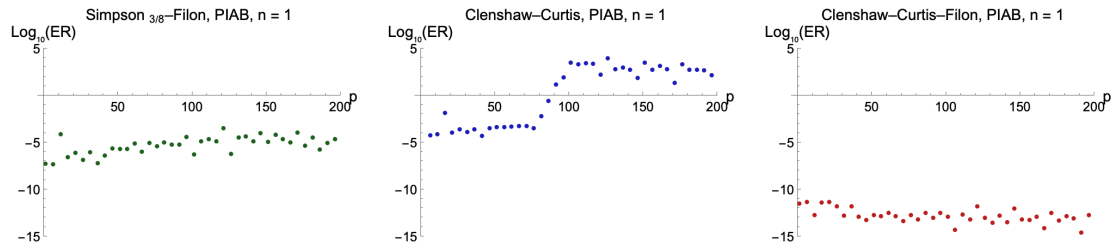


Figura 5.1: Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson_{3/8}-Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema PIAB con $n = 1$.

En la Figura [5.1](#) se presenta una comparación entre tres métodos numéricos aplicados al cálculo de la transformada de Dirac-Fourier para el sistema de la PIAB en su estado fundamental ($n = 1$), enfocándose en el comportamiento del error relativo logarítmico $\log_{10}(ER)$ en función de p .

El método Simpson_{3/8}-Filon, mostrado en la gráfica izquierda (color verde), exhibe una precisión moderadamente alta y, lo que es más relevante, estable. El error relativo se mantiene aproximadamente entre 10^{-5} y 10^{-7} , lo que indica una consistencia aceptable en la presencia de oscilaciones crecientes del integrando. Este comportamiento sugiere que, aunque el método no alcanza errores extremadamente bajos, es adecuado para un rango amplio de valores de p , ofreciendo una

solución confiable.

En contraste, el método Clenshaw–Curtis, representado en la gráfica central (color azul), comienza con un error relativo en el orden de 10^{-5} , aproximadamente, pero conforme se incrementa p , el error aumenta significativamente, incluso acercándose a 10^0 . Esta tendencia refleja la limitación del método para manejar integrandos altamente oscilatorios, lo que compromete su confiabilidad en este tipo de problemas.

Finalmente, el método Clenshaw–Curtis–Filon, mostrado en la gráfica derecha (color rojo), demuestra un desempeño notablemente superior. El error relativo se mantiene en un intervalo muy reducido entre 10^{-10} y 10^{-15} , evidenciando una precisión extremadamente alta y una estabilidad notable.

A continuación se presentan los resultados obtenidos al calcular la transformada de Dirac-Fourier para una partícula en una caja en su estado basal utilizando tres variantes numéricas distintos:

- **Variante 1 CCF (Fortran + ω_k Analítico + Trapecio compuesto):** cálculo de los coeficientes ω_k de forma analítica y la segunda integral mediante regla del trapecio compuesta, implementado en `Fortran`.
- **Variante 2 (Mathematica + ω_k Analítico + Trapecio compuesto):** mismo esquema que la Variante 1, pero implementado en `Mathematica`.
- **Variante 3 (Mathematica + `NIntegrate`):** cálculo completo de la transformada de Dirac-Fourier (TDF) utilizando la función `NIntegrate` y las rutinas predeterminadas que proporciona `Mathematica`.

La tabla muestra los errores relativos (en escala logarítmica base 10) en la estimación de la transformada de Dirac-Fourier para una partícula en una caja en su estado fundamental.

- En general, las tres Variantes ofrecen errores del orden de 10^{-11} a 10^{-14} , indicando una alta precisión.

Cuadro 5.1: Comparación de log-errores relativos $\log_{10}(\text{ER})$ de la TDF para PIAB en el estado base con diferentes variantes numéricas (fragmento).

p	Variante 1 (Fortran)	Variante 2 (Mathematica)	Variante 3 (NIntegrate)
1	-13.4430	-12.9019	-13.3986
6	-10.2598	-15.0147	-13.5964
11	-11.6639	-11.8927	-10.3827
16	-11.3356	-13.1159	-13.4426
21	-11.2480	-13.4588	-12.3603
26	-11.7549	-12.9598	-12.8109
31	-12.7022	-12.7517	-12.5247
36	-11.7462	-12.3576	-11.6454
41	-12.8507	-12.8213	-14.3411
46	-13.2078	-12.7057	-11.9381
51	-12.6833	-12.6975	-12.5575
56	-12.8056	-13.0201	-12.3220
61	-12.4141	-12.1986	-11.7293
66	-12.7655	-13.2841	-12.9411
71	-13.3097	-12.2289	-11.7023
76	-12.6782	-14.1762	-12.4477
81	-13.1204	-12.6175	-12.1768
86	-12.4477	-12.8114	-11.7595
91	-12.9310	-12.7637	-12.7972
96	-12.4088	-12.1666	-11.3198
101	-12.8103	-12.8571	-12.4004
106	-14.2336	-12.5574	-11.9636
111	-12.6010	-12.9923	-11.7733
116	-13.1535	-12.6498	-12.4914
121	-11.7416	-11.9612	-10.6338
126	-12.9424	-12.6644	-12.4662
131	-13.4790	-12.5875	-11.7503
136	-12.7030	-12.6202	-11.7986
141	-13.4480	-12.6275	-12.2257
146	-11.9889	-12.3324	-10.7858
151	-13.0994	-12.5913	-12.6463
156	-13.2013	-12.7829	-11.5466

- La **Variante 1** (Fortran con CCF analítico) muestra en muchos casos un ligero mejor rendimiento que la **Variante 2 y 3**, lo cual puede atribuirse al manejo interno de la precisión y redondeo que ofrece Fortran.
- Es importante notar que la **Variante 3** presenta un desempeño ligeramente inferior al de las **Variante 1 y 2** para valores grandes de p .
- Las pequeñas variaciones entre las Variantes reflejan diferencias tanto en la implementación como en el manejo numérico de los algoritmos de integración.

En conclusión, aunque las tres Variantes logran resolver la transformada con buena precisión, las Variantes basados en el método de Clenshaw–Curtis–Filon con evaluación analítica de ω_k son más robustos y estables frente a funciones oscilatorias, especialmente si se implementan en entornos simbólicos como Mathematica.

Por otro lado, la Variante 3, que se implementa utilizando `NIntegrate` [49], se observa que ofrece buenos resultados en la aproximación de integrales oscilatorias. Esta herramienta es ampliamente utilizada por numerosos investigadores debido a su eficacia y facilidad de uso. No obstante, es importante señalar que, al tratarse de una rutina interna compleja, no siempre resulta completamente transparente; no se conoce con detalle cómo se ejecutan las operaciones internas ni qué algoritmos específicos se aplican en cada caso. Esta característica convierte su funcionamiento en una especie de “caja negra”, dificultando en algunos casos la comprensión detallada del procedimiento numérico y la posibilidad de ajustar parámetros en problemas muy específicos.

5.1.2. Análisis de los estados excitados de la PIAB

En esta sección se presentan y analizan los resultados obtenidos al aplicar tres métodos de integración numérica —Simpson_{3/8}-Filon, Clenshaw-Curtis y Clenshaw-Curtis-Filon— para calcular la transformada de Dirac-Fourier del sistema de la partícula en una caja en distintos estados excitados. Estos métodos están diseñados para evaluar con alta precisión integrales altamente oscilatorias, lo cual

resulta fundamental en este contexto, ya que el aumento del número cuántico de excitación conlleva un incremento en la frecuencia de oscilación de la función de onda.

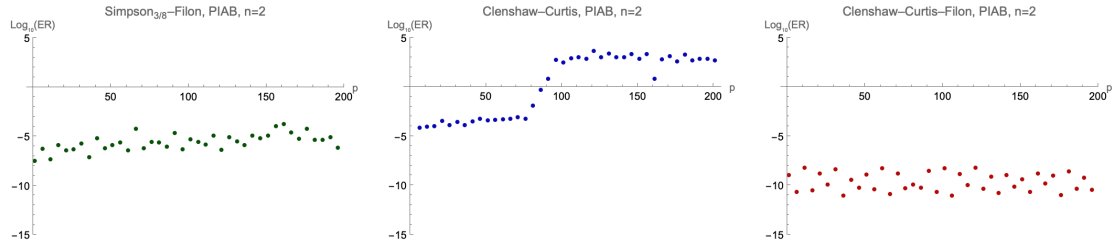


Figura 5.2: Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson $_{3/8}$ -Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema PIAB con $n = 2$

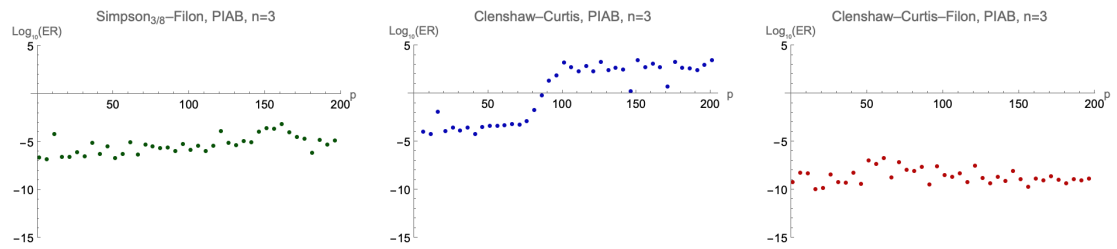


Figura 5.3: Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson $_{3/8}$ -Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema PIAB con $n = 3$

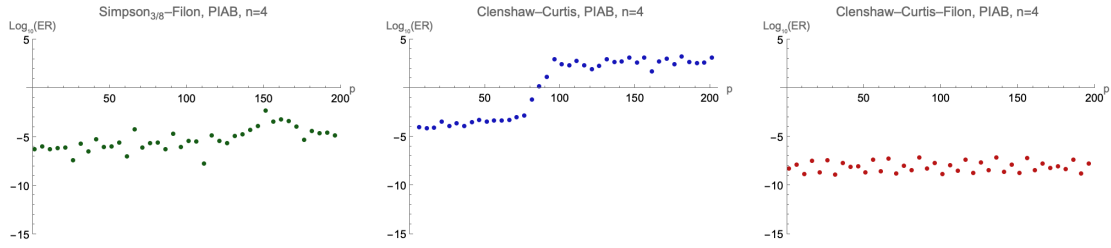


Figura 5.4: Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson_{3/8}-Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema PIAB con $n = 4$

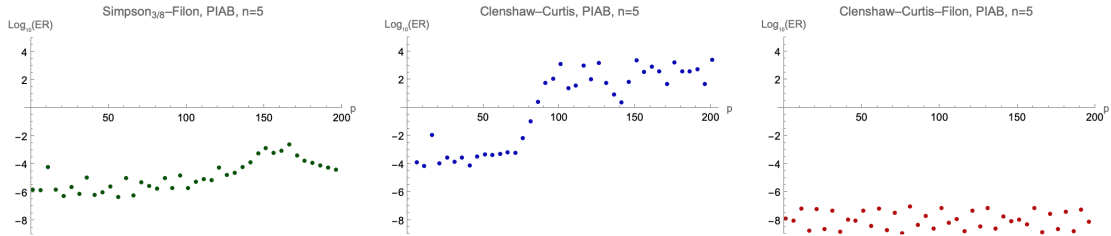


Figura 5.5: Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson_{3/8}-Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema PIAB con $n = 5$

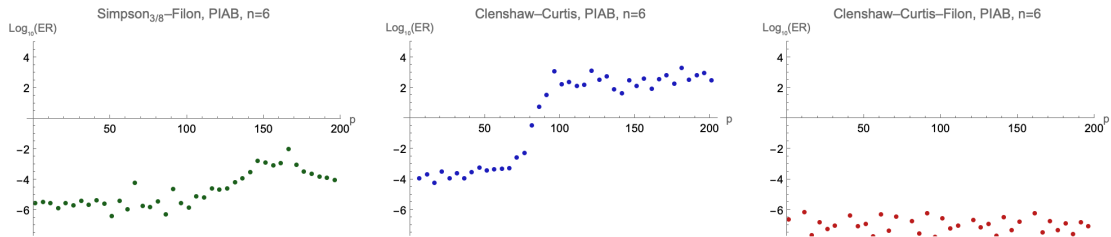


Figura 5.6: Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson_{3/8}-Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema PIAB con $n = 6$

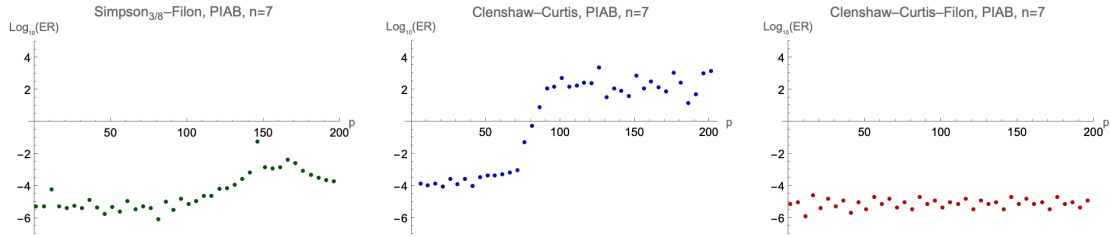


Figura 5.7: Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson $_{3/8}$ -Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema PIAB con $n = 7$

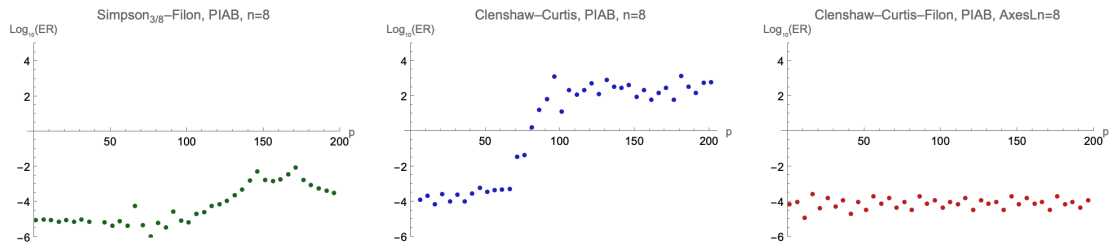


Figura 5.8: Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson $_{3/8}$ -Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema PIAB con $n = 8$

Las gráficas obtenidas para la partícula en una caja en distintos niveles excitados las Figuras [5.2](#), [5.3](#), [5.4](#), [5.5](#), [5.6](#), [5.7](#), [5.8](#) muestran que, al incrementarse el nivel de excitación, todos los métodos considerados —Simpson $_{3/8}$ -Filon, Clenshaw-Curtis y Clenshaw-Curtis-Filon— experimentan una pérdida progresiva de precisión. Esto se debe a que el aumento en la excitación incrementa la frecuencia de oscilación de la función de onda, lo cual dificulta una evaluación numérica precisa de la transformada.

Cabe destacar que los métodos Simpson $_{3/8}$ -Filon y Clenshaw-Curtis-Filon ofrecen resultados muy similares y de alta precisión en la mayoría de los casos. El método de Clenshaw-Curtis, por su parte, muestra un buen desempeño únicamente para valores pequeños de p , pero su precisión disminuye significativamente

conforme p aumenta. Aunque el método de Simpson_{3/8}-Filon presenta resultados cercanos a los del Clenshaw-Curtis-Filon, se observa una ligera desviación conforme crece el valor de p . En contraste, el método de Clenshaw-Curtis-Filon mantiene una mayor estabilidad y consistencia incluso para valores elevados de p y en estados excitados.

Esta observación resulta crucial para comprender las limitaciones del método Clenshaw-Curtis-Filon (CCF) en aplicaciones prácticas, y justifica la necesidad de desarrollar estrategias que permitan conservar la exactitud numérica al tratar con integrales altamente oscilatorias. La pérdida de precisión observada se atribuye, en parte, a la magnitud de los coeficientes ω_k , los cuales pueden alcanzar valores extremadamente grandes cuando p incrementa, generando errores de redondeo significativos. Este efecto se acentúa en estados cuánticos altamente excitados, donde las oscilaciones de las funciones involucradas son más pronunciadas. En contraste, al emplear la rutina `NIntegrate` de *Mathematica*, no se evidencia una pérdida notable de precisión, lo cual puede corroborarse en los resultados y gráficas presentados en el apéndice de esta tesis.

5.2. Métodos aplicados al oscilador armónico confinado

5.2.1. Análisis del estado basal HOC($n = 0$)

En las gráficas mostradas en la Figura [5.9](#), se presentan los resultados obtenidos al calcular la transformada de Dirac-Fourier mediante tres métodos numéricos: Simpson_{3/8}-Filon compuesto, Clenshaw-Curtis y Clenshaw-Curtis-Filon, aplicados al sistema del HOC en su estado fundamental ($n = 0$).

Cabe recordar que este sistema cuántico confinado *no posee una solución analítica conocida*, por lo que se utilizó la rutina `NIntegrate` de *Mathematica* como *referencia numérica*. A partir de esta función de referencia, se calcularon los errores relativos de los métodos propuestos, y posteriormente se aplicó el *logaritmo en base 10* de dichos errores. Los resultados obtenidos se presentan a

continuación.

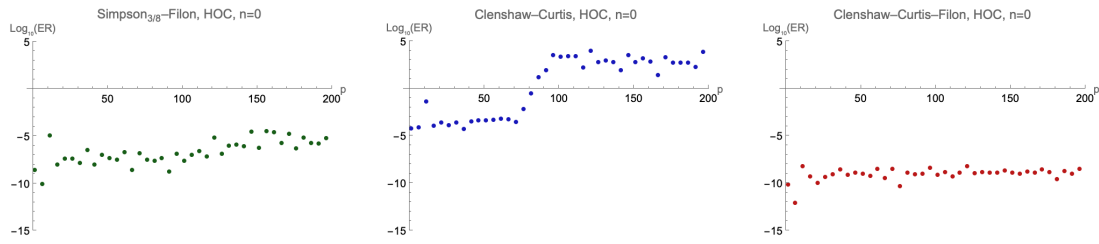


Figura 5.9: Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson $_{3/8}$ -Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema HOC con $n = 0$

En la Figura [5.9](#) se comparan tres métodos numéricos empleados para calcular la transformada de Dirac-Fourier en el sistema del HOC en su estado basal, con énfasis en el comportamiento del error relativo logarítmico $\log_{10}(ER)$ en función de p .

El método Simpson $_{3/8}$ -Filon, representado en la gráfica izquierda (color verde), muestra una precisión moderadamente alta y, lo que es más importante, una estabilidad considerable. El error relativo se mantiene en el rango aproximado de 10^{-5} a 10^{-7} , lo que indica un desempeño aceptable ante la creciente oscilación del integrando. Este comportamiento sugiere que, si bien no alcanza los errores más bajos, ofrece una solución confiable en un amplio intervalo de p , aunque si empieza a decrecer el logaritmo del error relativo cuando p es más grande.

En cambio, el método Clenshaw-Curtis, ilustrado en la gráfica central (color azul), comienza con un error relativo del orden de 10^{-5} , pero este se incrementa significativamente conforme aumenta p , llegando incluso a valores cercanos a 10^0 . Esta tendencia evidencia las limitaciones del método frente a integrandos altamente oscilatorios, comprometiendo su confiabilidad para este tipo de problemas.

Por otro lado, el método Clenshaw-Curtis-Filon, mostrado en la gráfica derecha (color rojo), exhibe un desempeño significativamente superior. El error relativo se mantiene en un intervalo muy reducido, entre 10^{-8} y 10^{-10} , lo que refleja una precisión extraordinariamente alta y una notable estabilidad frente a las variacio-

nes de p .

5.2.2. Análisis de los estados excitados del HOC

En esta sección se presentan y analizan los resultados obtenidos al aplicar tres métodos de integración numérica —Simpson_{3/8}-Filon, Clenshaw-Curtis y Clenshaw-Curtis-Filon— para calcular la transformada de Dirac-Fourier del sistema del oscilador armónico confinado en distintos estados excitados. Al igual que en el caso de la partícula en una caja, estos métodos están diseñados para evaluar con alta precisión integrales altamente oscilatorias, lo cual es esencial dado que el incremento en el nivel de excitación se traduce en una mayor complejidad y oscilación en la función de onda del sistema.

Para el primer estado excitado del sistema del oscilador armónico confinado , la función de onda utilizada está dada por:

$$\boxed{\psi_1^{HOC}(x) = 1.057309699111758 e^{-\frac{x^2}{2}} {}_1F_1\left(0.75 - \frac{5.07558201522678}{2}, 1.5, x^2\right)} \quad (5.3)$$

donde ${}_1F_1$ representa la función hipergeométrica confluyente. A partir de esta función, se calculó la transformada de Dirac-Fourier aplicando los métodos numéricos Simpson_{3/8}-Filon (S_{3/8}-F), Clenshaw-Curtis (CC) y Clenshaw-Curtis-Filon (CCF). En la Figura [5.3](#) se muestra la gráfica obtenida, la cual permite comparar visualmente el desempeño de cada uno de los métodos en la evaluación de la TDF de este estado excitado.

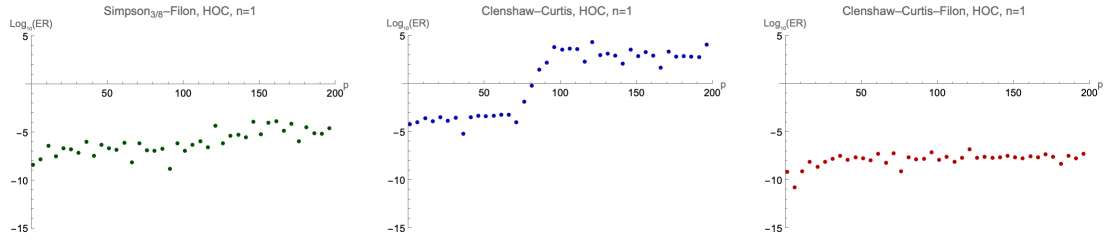


Figura 5.10: Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson $_{3/8}$ -Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema HOC con $n = 1$

Para el tercer estado excitado ($n = 2$) del sistema del oscilador armónico confinado, la función de onda correspondiente toma la forma:

$$\psi_2^{HOC}(x) = 0.9967998024848309 e^{-\frac{x^2}{2}} {}_1F_1\left(0.25 - \frac{11.25882578148291}{2}, 0.5, x^2\right) \quad (5.4)$$

donde ${}_1F_1$ representa nuevamente la función hipergeométrica confluyente. Para este estado excitado, se repite el procedimiento de calcular la transformada de Dirac-Fourier mediante los métodos Simpson $_{3/8}$ -Filon ($S_{3/8}$ -F), Clenshaw-Curtis (CC) y Clenshaw-Curtis-Filon (CCF). La Figura 5.5 muestra los resultados correspondientes a este nivel de energía, en donde se puede observar un incremento en la complejidad del patrón oscilatorio. Esto pone a prueba la capacidad de cada método para mantener la precisión en presencia de oscilaciones más marcadas.

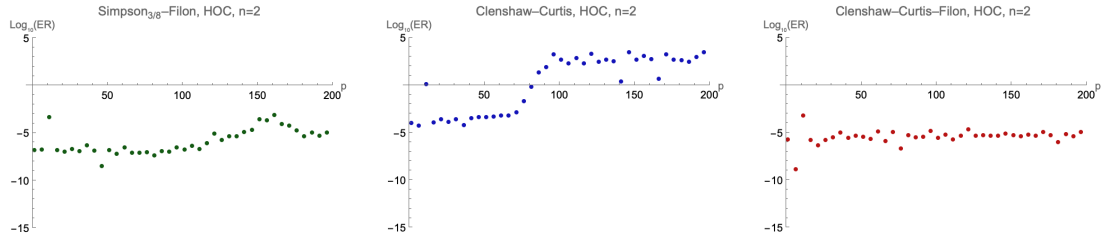


Figura 5.11: Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson $_{3/8}$ -Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema HOC con $n = 2$

Para el tercer estado excitado ($n = 3$) del sistema del oscilador armónico confinado, la función de onda correspondiente toma la forma:

$$\psi_3^{HOC}(x) = 1.4534042679267976 e^{-\frac{x^2}{2}} {}_1F_1\left(0.75 - \frac{19.899696501830086}{2}, 1.5, x^2\right) \quad (5.5)$$

donde ${}_1F_1$ representa nuevamente la función hipergeométrica confluyente. Para este estado más excitado, se repite el procedimiento de calcular la transformada de Dirac-Fourier mediante los métodos Simpson $_{3/8}$ -Filon (S $_{3/8}$ -F), Clenshaw-Curtis (CC) y Clenshaw-Curtis-Filon (CCF). La Figura 5.5 muestra los resultados correspondientes a este nivel de energía, en donde se puede observar un incremento en la complejidad del patrón oscilatorio. Esto pone a prueba la capacidad de cada método para mantener la precisión en presencia de oscilaciones más marcadas.

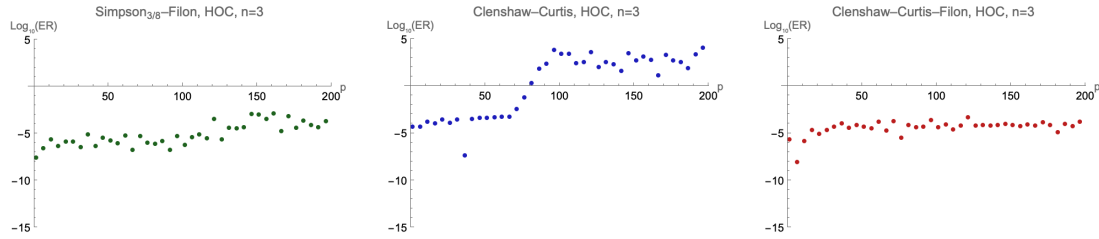


Figura 5.12: Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson $_{3/8}$ -Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema HOC con $n = 3$

Para el cuarto estado excitado ($n = 4$) del oscilador armónico confinado, la función de onda toma la forma:

$$\psi_4^{HOC}(x) = 0.9987171584870606 e^{-\frac{x^2}{2}} {}_1F_1\left(0.25 - \frac{31.005254506369628}{2}, 0.5, x^2\right) \quad (5.6)$$

donde se observa un mayor número de nodos en comparación con los estados anteriores, lo cual está directamente relacionado con el nivel de energía. Para este estado, se aplicaron nuevamente los tres métodos numéricos —Simpson $_{3/8}$ -Filon (S $_{3/8}$ -F), Clenshaw-Curtis (CC) y Clenshaw-Curtis-Filon (CCF)— para calcular la transformada de Dirac-Fourier. En la Figura 5.13 se presentan los resultados obtenidos. El aumento de la oscilación en la función de onda, reflejado en la transformada, desafía aún más la precisión de los métodos implementados. Sin embargo, se sigue observando que los métodos que incorporan información de la oscilación (S $_{3/8}$ -F y CCF) ofrecen mejores resultados que el método Clenshaw-Curtis clásico en estas condiciones.

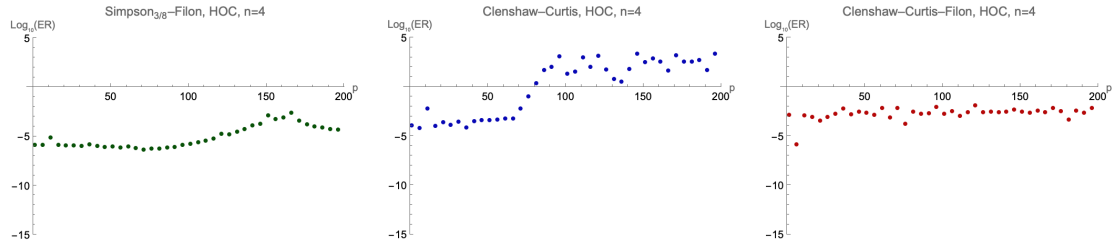


Figura 5.13: Gráficas de $\log_{10}(ER)$ vs. p . De izquierda a derecha: Método de Simpson $_{3/8}$ -Filon compuesto ($N = 50$), Método de Clenshaw-Curtis ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$) y Método de Clenshaw-Curtis-Filon ($a_k = 10$, calculado con el método del trapecio compuesto y una $N = 50$, y $\omega_{2k} = 10$, obtenido a partir de sus valores analíticos). Resultados para el sistema HOC con $n = 4$

El análisis de las gráficas mantiene una tendencia similar a la observada en el sistema de la partícula en una caja. No obstante, se presenta una diferencia significativa al considerar el quinto estado excitado ($n = 5$) del sistema HOC: todos los métodos numéricos empleados comienzan a mostrar problemas de precisión, lo cual se traduce en resultados notablemente menos confiables. Cabe destacar que se toma como referencia la rutina `NIntegrate` de *Mathematica*, junto con la función especial `Hypergeometric1F1`, como estimación de la solución efectiva o analítica. Aunque no se puede asegurar que esta referencia represente el valor exacto, se asume como punto de comparación razonable. En este contexto, se ha comprobado que para los primeros niveles excitados, el método de Clenshaw-Curtis-Filon (CCF) puede alcanzar una precisión del orden de 10^{-10} , lo cual sugiere que, al menos en esos casos, los métodos implementados son confiables. Sin embargo, al aumentar el número cuántico, la creciente oscilación de las funciones de onda representa un desafío considerable para la precisión de los esquemas numéricos utilizados.

Capítulo 6

Conclusiones y perspectivas

6.1. Conclusiones generales.

Se logró calcular la **Transformada de Dirac-Fourier (TDF)** en sistemas cuánticos confinados unidimensionales; la Partícula en una Caja en su estado basal y en distintos estados excitados y el Oscilador Armónico confinado en su estado basal y en estados excitados. Los resultados obtenidos fueron satisfactorios, particularmente para valores pequeños del parámetro p , confirmando la eficacia de utilizar esquemas avanzados de integración en este contexto. El éxito se basó en la aplicación comparada de tres métodos numéricos: Simpson_{3/8}-Filon compuesto con $N = 50$, Clenshaw-Curtis con $a_k = 10$ calculados mediante el método del trapecio compuesto con $N = 50$, y Clenshaw-Curtis-Filon, también con $a_k = 10$ obtenidos mediante el trapecio compuesto y ω_k evaluados a partir de sus expresiones analíticas.

6.2. Conclusiones específicas

Se obtuvieron resultados al aplicar tres métodos numéricos de integración —Simpson_{3/8}-Filon, Clenshaw-Curtis y Clenshaw-Curtis-Filon— para calcular la transformada de Dirac-Fourier en sistemas cuánticos confinados unidimensionales: la partícula en una caja, en distintos estados excitados, y el oscilador armónico cuántico confinado, evaluados ambos en el intervalo $[-1, 1]$.

- Se comprobó que los métodos clásicos de integración, como el método del trapecio y otros pertenecientes a la familia de Newton-Cotes, no son adecuados para integrales con integrandos altamente oscilatorios, ya que presentan errores considerables incluso para valores pequeños de p .
- A medida que se incrementa el valor de p , el integrando se vuelve más oscilatorio, lo cual exige el uso de métodos especializados. En estos casos, los métodos Simpson_{3/8}-Filon, Clenshaw-Curtis y Clenshaw-Curtis-Filon mostraron un desempeño significativamente mejor. El método de Clenshaw-Curtis-Filon fue el que alcanzó la mayor precisión en el estado basal, superando a los otros dos. No obstante, el método Simpson_{3/8}-Filon también obtuvo resultados aceptables. El método Clenshaw-Curtis simple mostró un buen comportamiento únicamente para valores bajos de p ; su precisión se reduce conforme p aumenta.
- Para los primeros estados excitados de ambos sistemas (por ejemplo, $n = 2$ y $n = 3$ en PIAB, y $n = 1$ y $n = 2$ en HOC), el método Clenshaw-Curtis-Filon volvió a destacar por su alta precisión. El método Simpson_{3/8}-Filon también logró resultados razonablemente buenos, aunque no tan precisos como los del primero. En contraste, el método Clenshaw-Curtis simple nuevamente mostró limitaciones conforme el valor de p creció.
- Se observó que el aumento simultáneo de p y del nivel de excitación tiene un efecto acumulativo sobre la precisión, afectando la estabilidad y fidelidad de los métodos numéricos, tanto en PIAB como en HOC.
- En niveles altamente excitados (valores altos de n), los tres métodos analizados presentaron dificultades para mantener una precisión adecuada. A pesar de esto, se realizó un análisis detallado en el que se observó que, incluso con múltiples subdivisiones del intervalo y el uso de Simpson_{3/8} como esquema base, el método Clenshaw-Curtis-Filon pierde eficacia, reflejando las limitaciones inherentes de las aproximaciones numéricas cuando la función oscilatoria presenta muchas oscilaciones en el dominio de integración.

- El método Clenshaw-Curtis mostró buen desempeño únicamente para valores bajos de p , perdiendo efectividad conforme se incrementa la oscilación del integrando.
- Aunque todos los métodos empleados tienen un bajo costo computacional, la dificultad principal radica en el tratamiento numérico de funciones altamente oscilatorias. En este sentido, Mathematica resultó una herramienta útil para verificar y comparar resultados, en particular para el sistema del oscilador armónico confinado, que no cuenta con soluciones analíticas en el espacio de momentos.

6.3. Perspectivas

A partir de los resultados obtenidos, una de las principales líneas de trabajo futuro consiste en mejorar la implementación del método CCF en lenguaje Fortran. Se ha observado que las funciones ω_k presentan una pérdida significativa de rendimiento numérico a medida que el parámetro oscilatorio p se incrementa, lo cual puede deberse a errores de redondeo acumulativos en los cálculos de las expresiones analíticas. De manera similar, las a_k pierden estabilidad conforme aumenta el orden k de la aproximación o el número cuántico n , lo que limita la precisión de los resultados en estos regímenes. Por tanto, sería conveniente explorar la implementación de nuevas rutinas numéricas o el uso de reglas de cuadratura especializadas que permitan mejorar la estabilidad y precisión de la integración oscilatoria cuando p , k y n toman valores grandes. Asimismo, se considera pertinente explorar métodos especializados en la integración de funciones oscilatorias, tales como aquellos basados en interpolaciones con distintos tipos de polinomios, esquemas de cuadratura alternativos o técnicas asintóticas. Estas metodologías podrían proporcionar una mayor robustez numérica frente al aumento de la frecuencia del integrando, contribuyendo así a una mejor caracterización de sistemas cuánticos confinados en el dominio del momento.

Una línea futura de investigación particularmente desafiante y prometedora

es la extensión del estudio a sistemas cuánticos confinados en más de una dimensión. En estos casos, tanto la función de onda como su transformada de Fourier se tornan más complejas, y en lugar del kernel $\exp(-ipx)$, es común que intervengan funciones especiales como las de Bessel en coordenadas polares o para las integrales sobre coordenadas radiales. Esta generalización abriría la posibilidad de aplicar los métodos desarrollados a problemas de interés físico más realistas, como pozos cuánticos bidimensionales o confinamientos esféricos, donde las propiedades del momento y la energía adquieren un carácter multidimensional.

Bibliografía

- [1] Shannon, Claude E: *A mathematical theory of communication*. The Bell system technical journal, 27(3):379–423, 1948.
- [2] Cover, Thomas M: *Elements of information theory*. John Wiley & Sons, 1999.
- [3] United Nations General Assembly: *International Year of Quantum Science and Technology, 2025*, 2023. <https://digitallibrary.un.org/record/4018593>, Resolution A/RES/78/242.
- [4] Planck, Max: *On the Law of Distribution of Energy in the Normal Spectrum*. Annalen der Physik, 309(3):553–563, 1901.
- [5] Einstein, Albert: *On a Heuristic Viewpoint Concerning the Production and Transformation of Light*. Annalen der Physik, 17:132–148, 1905.
- [6] Broglie, Louis de: *Recherches sur la théorie des quanta*. Tesis de Doctorado, Annales de Physique, 1925.
- [7] Davisson, Clinton y Lester H. Germer: *Diffraction of Electrons by a Crystal of Nickel*. Physical Review, 30(6):705–740, 1927.
- [8] Schrödinger, Erwin: *Quantisierung als Eigenwertproblem*. Annalen der Physik, 384(4):361–376, 1926.
- [9] Born, Max: *Zur Quantenmechanik der Stoßvorgänge*. Zeitschrift für Physik, 37(12):863–867, 1926.
- [10] Messiah, Albert: *Quantum Mechanics*. Dover Publications, 1999.
- [11] Mabuchi, Hideo y Navin Khaneja: *Principles and applications of control in quantum systems*. International Journal of Robust and Nonlinear Control: IFAC-Affiliated Journal, 15(15):647–667, 2005.

- [12] Melnikov, Alexey A y cols.: *Learning quantum systems*. Nature Reviews Physics, 2(7):341–356, 2020.
- [13] Breuer, Heinz Peter, Elsi Mari Laine, Jyrki Piilo y Bassano Vacchini: *Colloquium: Non-Markovian dynamics in open quantum systems*. Reviews of Modern Physics, 88(2):021002, 2016.
- [14] Rodriguez-Bautista, Mariano, Cecilia Díaz-García, Alejandra M Navarrete-López, Rubicelia Vargas y Jorge Garza: *Roothaan’s approach to solve the Hartree-Fock equations for atoms confined by soft walls: Basis set with correct asymptotic behavior*. The Journal of Chemical Physics, 143(3), 2015.
- [15] Salazar, S. J., H. G. Laguna, V. Prasad y R. P. Sagar: *Shannon-information entropy sum in the confined hydrogenic atom*. International Journal of Quantum Chemistry, 120(11):e26188, 2020.
- [16] Estañón, CR, HE Montgomery Jr, JC Angulo y Norberto Aquino: *The confined helium atom: An information-theoretic approach*. International Journal of Quantum Chemistry, 124(4):e27358, 2024.
- [17] Montgomery, H.E., G. Campoy y N. Aquino: *The confined N-dimensional harmonic oscillator revisited*. Physica Scripta, 81(4):045010, 2010.
- [18] The Nobel Prize in Chemistry 2023: *The Nobel Prize in Chemistry 2023 - for the discovery and development of quantum dots*. <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2023/summary/>, 2023. Accessed: 2025-04-11.
- [19] Levine, N: *Química Cuántica 5 ta edición*. Prentice Hall, Madrid, 2001.
- [20] Laguna, Humberto G y Robin P Sagar: *Quantum uncertainties of the confined Harmonic Oscillator in position, momentum and phase-space*. Annalen der Physik, 526(11-12):555–566, 2014.
- [21] Abramowitz, Milton, Irene A Stegun y Robert H Romer: *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables*, 1988.

- [22] Griffiths, David J.: *Introduction to Quantum Mechanics*. Pearson Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, 2nd edición, 2005.
- [23] Cohen-Tannoudji, Claude, Bernard Diu y Franck Lalöe: *Quantum Mechanics, Volume 1*. Wiley-Interscience, New York, 1977.
- [24] Heisenberg, Werner: *Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik*. Zeitschrift für Physik, 43(3):172–198, 1927.
- [25] Heisenberg, Werner: *On stability and turbulence of fluid flows*. Informe técnico, 1951.
- [26] Kennard, EH: *On the quantum mechanics of a system of particles*. Physical Review, 31(5):876, 1928.
- [27] Robertson, Howard Percy: *The uncertainty principle*. Physical Review, 34(1):163, 1929.
- [28] Białynicki-Birula, Iwo y Jerzy Mycielski: *Uncertainty relations for information entropy in wave mechanics*. Communications in Mathematical Physics, 44:129–132, 1975.
- [29] Beckner, William: *Inequalities in Fourier analysis*. Annals of Mathematics, 102(1):159–182, 1975.
- [30] Hertz, Anaëlle y Nicolas J Cerf: *Continuous-variable entropic uncertainty relations*. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 52(17):173001, 2019.
- [31] Santos, Ademir de J, Frederico V Prudente, Marcilio N Guimarães y Wallas S Nascimento: *A study of strong confinement regions using informational entropy*. Quantum Reports, 4(4):544–557, 2022.
- [32] Lozej Črt: *Spectral form factors and dynamical localization*. arXiv preprint, 2023. <https://arxiv.org/abs/2301.12908>
- [33] Robinett, R. W.: *Quantum wave packet revivals*. Physics Reports, 392(1-2):1–119, 2004.
- [34] Ballentine, Leslie E: *Quantum mechanics: a modern development*. World Scientific Publishing Company, 2014.

- [35] Escobar Zamora, Iván: *Cálculo numérico y analítico de las ecuaciones de Karman-Prandtl para la estimación de coeficiente de fricción*. 2014.
- [36] Gerald, Curtis F y Patrick O Wheatley: *Análisis numérico con aplicaciones*. 2000.
- [37] Nieves, Antonio y Federico C Dominguez: *Métodos numéricos aplicados a la ingeniería*. 2002.
- [38] Simos, TE: *Closed Newton–Cotes trigonometrically-fitted formulae of high order for the numerical integration of the Schrödinger equation*. Journal of mathematical chemistry, 44(2):483–499, 2008.
- [39] Filon, Louis Napoleon George: *III.—On a quadrature formula for trigonometric integrals*. Proceedings of the Royal Society of Edinburgh, 49:38–47, 1930.
- [40] D’Ambrosio, Raffaele y Carmela Scalone: *Filon quadrature for stochastic oscillators driven by time-varying forces*. Applied Numerical Mathematics, 169:21–31, 2021.
- [41] Tuck, EO: *A simple Filon-trapezoidal rule*. Mathematics of Computation, 21(98):239–241, 1967.
- [42] Barakat, R y BH Sandler: *Filon trapezoidal schemes for Hankel transforms of orders zero and one*. Computers & Mathematics with Applications, 40(8-9):1037–1041, 2000.
- [43] Potticary, Shaun: *Efficient evaluation of highly oscillatory integrals*, University of Reading, (Master’s thesis), 2005.
- [44] Clenshaw, Charles W y Alan R Curtis: *A method for numerical integration on an automatic computer*. Numerische Mathematik, 2:197–205, 1960.
- [45] Dominguez, Victor, IG Graham y VP Smyshlyaev: *Stability and error estimates for Filon–Clenshaw–Curtis rules for highly oscillatory integrals*. IMA journal of numerical analysis, 31(4):1253–1280, 2011.

- [46] Piessens, Robert y Maria Branders: *Computation of oscillating integrals*. Journal of Computational and Applied Mathematics, 1(3):153–164, 1975.
- [47] Xiang, Shuhuang, Yeol Je Cho, Haiyong Wang y Hermann Brunner: *Clenshaw–Curtis–Filon-type methods for highly oscillatory Bessel transforms and applications*. IMA Journal of Numerical Analysis, 31(4):1281–1314, 2011.
- [48] Dominguez, Víctor, Ivan G Graham y Tatiana Kim: *Filon–Clenshaw–Curtis rules for highly oscillatory integrals with algebraic singularities and stationary points*. SIAM Journal on Numerical Analysis, 51(3):1542–1566, 2013.
- [49] Inc., Wolfram Research,: *Mathematica, Version 14.1*. <https://www.wolfram.com/mathematica>, Champaign, IL, 2025.
- [50] Piessens, Robert y Maria Branders: *Computation of Fourier transform integrals using Chebyshev series expansions*. Computing, 32(2):177–186, 1984.

Apéndice

1. Desarrollo de las fórmulas de cuadratura

En este apartado del apéndice se presentan las deducciones matemáticas de las reglas de cuadratura empleadas a lo largo de este trabajo. Para cada método se muestran los pasos intermedios que conducen a la obtención de los coeficientes de integración, destacando su formulación general y los casos particulares considerados. Asimismo, se justifica la pertinencia de cada aproximación, tanto en el marco de las cuadraturas clásicas como en las adaptaciones de tipo Filon, las cuales resultan especialmente adecuadas para el tratamiento de integrales oscilatorias.

1.1. Método del trapecio

Trapecio para un segmento

El método del trapecio en un solo segmento aproxima la integral de $f(x)$ en $[x_0, x_N]$ mediante la expresión

$$I_{\text{Tsegmento}} = \lambda_\alpha f(x_0) + \lambda_\beta f(x_N).$$

Para determinar los coeficientes λ_α y λ_β , se impone que la fórmula sea exacta para los polinomios de grado 1. De esta forma, se obtiene el sistema:

$$\lambda_\alpha + \lambda_\beta = \int_{x_0}^{x_N} dx = x_N - x_0,$$

$$\lambda_\alpha x_0 + \lambda_\beta x_N = \int_{x_0}^{x_N} x dx = \frac{x_N^2 - x_0^2}{2}.$$

Resolviendo el sistema se tiene

$$\lambda_\alpha = \lambda_\beta = \frac{x_N - x_0}{2}.$$

Por lo tanto, la fórmula del método del trapecio en un segmento es:

$$I_{\text{Tsegmento}} = \frac{x_N - x_0}{2} (f(x_0) + f(x_N))$$

Trapecio compuesto

Sea f continua en $[x_0, x_N]$, y sea $\{x_0, x_1, \dots, x_N\}$ un conjunto de $N+1$ nodos igualmente espaciados, con paso $h = \frac{x_N - x_0}{N}$, donde $x_i = x_0 + ih$.

Dividiendo la integral en N segmentos, se tiene

$$I(f) = \int_{x_0}^{x_N} f(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x) dx + \dots + \int_{x_{N-1}}^{x_N} f(x) dx$$

Aplicando el método del trapecio en cada segmento:

$$I_{TC} = h \frac{f(x_0) + f(x_1)}{2} + h \frac{f(x_1) + f(x_2)}{2} + \dots + h \frac{f(x_{N-1}) + f(x_N)}{2}$$

$$= \frac{h}{2} [f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + 2f(x_{N-1}) + f(x_N)].$$

Reordenando términos:

$$I_{TC} = \frac{h}{2} \left[f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) + f(x_N) \right].$$

Finalmente, sustituyendo $h = \frac{x_N - x_0}{N}$:

$$I_{TC} = \frac{x_N - x_0}{2N} \left[f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) + f(x_N) \right]$$

1.2. Método de Simpson

Simpson para un segmento

El método de Simpson aproxima la integral de $f(x)$ en $[x_0, x_N]$ mediante la interpolación cuadrática en los nodos x_0 , x_N y el punto medio $x_R = \frac{x_0 + x_N}{2}$:

$$I_{\text{segmento}} = \lambda_0 f(x_0) + \lambda_1 f(x_R) + \lambda_2 f(x_N).$$

Para determinar los coeficientes λ_0 , λ_1 y λ_2 , se impone que la fórmula sea exacta para polinomios de grado 2:

$$\begin{aligned} \lambda_0 + \lambda_1 + \lambda_2 &= \int_{x_0}^{x_N} dx = x_N - x_0, \\ \lambda_0 x_0 + \lambda_1 x_R + \lambda_2 x_N &= \int_{x_0}^{x_N} x dx = \frac{x_N^2 - x_0^2}{2}, \\ \lambda_0 x_0^2 + \lambda_1 x_R^2 + \lambda_2 x_N^2 &= \int_{x_0}^{x_N} x^2 dx = \frac{x_N^3 - x_0^3}{3}. \end{aligned}$$

Resolviendo el sistema se obtiene:

$$\lambda_0 = \lambda_2 = \frac{x_N - x_0}{6}, \quad \lambda_1 = -\frac{2(x_0 - x_N)}{3}.$$

La cuadratura de Simpson para un segmento se puede expresar inicialmente con los coeficientes calculados a partir del sistema de ecuaciones:

$$I_{\text{segmento}} = \left[\frac{x_N - x_0}{6} f(x_0) + \left(-\frac{2(x_0 - x_N)}{3} \right) f\left(\frac{x_0 + x_N}{2}\right) + \frac{x_N - x_0}{6} f(x_N) \right].$$

De manera equivalente, agrupando términos y escribiéndolo en la forma más usualmente utilizada:

$$I_{\text{Ssegmento}} = \frac{x_N - x_0}{6} \left[f(x_0) + 4f\left(\frac{x_0 + x_N}{2}\right) + f(x_N) \right]$$

Simpson compuesto

Sea f continua en $[x_0, x_N]$, y sea $\{x_0, x_1, \dots, x_N\}$ un conjunto de $N+1$ nodos igualmente espaciados, con paso $h = \frac{x_N - x_0}{N}$, donde $x_i = x_0 + ih$.

Dividiendo la integral en N segmentos:

$$I(f) = \int_{x_0}^{x_N} f(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x) dx + \dots + \int_{x_{N-1}}^{x_N} f(x) dx$$

Aplicando Simpson en cada segmento:

$$\begin{aligned} I_S(f) &= h \frac{f(x_0) + 4f\left(\frac{x_0+x_1}{2}\right) + f(x_1)}{6} + h \frac{f(x_1) + 4f\left(\frac{x_1+x_2}{2}\right) + f(x_2)}{6} \\ &\quad + \dots + h \frac{f(x_{N-1}) + 4f\left(\frac{x_{N-1}+x_N}{2}\right) + f(x_N)}{6} \\ &= \frac{h}{6} \left[f(x_0) + 4f\left(\frac{x_0 + x_1}{2}\right) + 2f(x_1) + 4f\left(\frac{x_1 + x_2}{2}\right) + 2f(x_2) \right. \\ &\quad \left. + \dots + 2f(x_{N-1}) + 4f\left(\frac{x_{N-1} + x_N}{2}\right) + f(x_N) \right]. \end{aligned}$$

Reordenando términos de forma que aparezcan las sumas explícitas:

$$I_S(f) = \frac{h}{6} \left[f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) + 4 \sum_{i=1}^N f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right) + f(x_N) \right].$$

Finalmente, sustituyendo $h = \frac{x_N - x_0}{N}$:

$$I_S(f) = \frac{x_N - x_0}{6N} \left[f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) + 4 \sum_{i=1}^N f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right) + f(x_N) \right]$$

1.3. Método de Simpson_{3/8}

Simpson_{3/8} para un segmento

El método de Simpson 3/8 aproxima la integral de $f(x)$ en $[x_0, x_N]$ mediante interpolación cúbica en los nodos

$$x_0, \quad x_R = \frac{2x_0 + x_N}{3}, \quad x_T = \frac{x_0 + 2x_N}{3}, \quad x_N.$$

La cuadratura se puede escribir como

$$I_{S3/8\text{segmento}} = \lambda_0 f(x_0) + \lambda_1 f(x_R) + \lambda_2 f(x_T) + \lambda_3 f(x_N).$$

Los coeficientes λ_i se determinan imponiendo exactitud para polinomios de grado 3:

$$\begin{aligned} \lambda_0 + \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 &= \int_{x_0}^{x_N} dx = x_N - x_0, \\ \lambda_0 x_0 + \lambda_1 x_R + \lambda_2 x_T + \lambda_3 x_N &= \int_{x_0}^{x_N} x dx = \frac{x_N^2 - x_0^2}{2}, \\ \lambda_0 x_0^2 + \lambda_1 x_R^2 + \lambda_2 x_T^2 + \lambda_3 x_N^2 &= \int_{x_0}^{x_N} x^2 dx = \frac{x_N^3 - x_0^3}{3}, \\ \lambda_0 x_0^3 + \lambda_1 x_R^3 + \lambda_2 x_T^3 + \lambda_3 x_N^3 &= \int_{x_0}^{x_N} x^3 dx = \frac{x_N^4 - x_0^4}{4}. \end{aligned}$$

Resolviendo el sistema se obtiene:

$$\lambda_0 = \lambda_3 = \frac{x_N - x_0}{8}, \quad \lambda_1 = \lambda_2 = \frac{3(x_N - x_0)}{8}.$$

La cuadratura puede escribirse de manera expandida como:

$$I_{S3/8\text{segmento}} = \left[\frac{x_N - x_0}{8} f(x_0) + \frac{3(x_N - x_0)}{8} f\left(\frac{2x_0 + x_N}{3}\right) + \frac{3(x_N - x_0)}{8} f\left(\frac{x_0 + 2x_N}{3}\right) + \frac{x_N - x_0}{8} f(x_N) \right]$$

De forma más compacta:

$$I_{S3/8\text{segmento}} = \frac{x_N - x_0}{8} \left[f(x_0) + 3f\left(\frac{2x_0 + x_N}{3}\right) + 3f\left(\frac{x_0 + 2x_N}{3}\right) + f(x_N) \right].$$

Simpson_{3/8} compuesto

Sea f continua en $[x_0, x_N]$, y sea $\{x_0, x_1, \dots, x_N\}$ un conjunto de $N+1$ nodos igualmente espaciados, con paso $h = \frac{x_N - x_0}{N}$, donde $x_i = x_0 + ih$. Dividiendo la integral en N segmentos, se tiene:

$$I(f) = \int_{x_0}^{x_N} f(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x) dx + \dots + \int_{x_{N-1}}^{x_N} f(x) dx$$

Aplicando Simpson 3/8 en cada segmento se tiene:

$$\begin{aligned} I_{S3/8} = & h \frac{f(x_0) + 3f\left(\frac{2x_0+x_1}{3}\right) + 3f\left(\frac{x_0+2x_1}{3}\right) + f(x_1)}{8} \\ & + h \frac{f(x_1) + 3f\left(\frac{2x_1+x_2}{3}\right) + 3f\left(\frac{x_1+2x_2}{3}\right) + f(x_2)}{8} \\ & + \dots + h \frac{f(x_{N-1}) + 3f\left(\frac{2x_{N-1}+x_N}{3}\right) + 3f\left(\frac{x_{N-1}+2x_N}{3}\right) + f(x_N)}{8}. \end{aligned}$$

Reordenando términos, se puede escribir como:

$$\begin{aligned}
I_{S3/8} &= \frac{h}{8} \left[f(x_0) + 3f\left(\frac{2x_0 + x_1}{3}\right) + 3f\left(\frac{x_0 + 2x_1}{3}\right) + f(x_1) \right. \\
&\quad + f(x_1) + 3f\left(\frac{2x_1 + x_2}{3}\right) + 3f\left(\frac{x_1 + 2x_2}{3}\right) + f(x_2) \\
&\quad + \cdots + \\
&\quad \left. f(x_{N-1}) + 3f\left(\frac{2x_{N-1} + x_N}{3}\right) + 3f\left(\frac{x_{N-1} + 2x_N}{3}\right) + f(x_N) \right] \\
&= \frac{h}{8} \left[f(x_0) + 3f\left(\frac{2x_0 + x_1}{3}\right) + 3f\left(\frac{x_0 + 2x_1}{3}\right) + 2f(x_1) \right. \\
&\quad + 3f\left(\frac{2x_1 + x_2}{3}\right) + 3f\left(\frac{x_1 + 2x_2}{3}\right) + 2f(x_2) \\
&\quad + \cdots + \\
&\quad \left. 2f(x_{N-1}) + 3f\left(\frac{2x_{N-1} + x_N}{3}\right) + 3f\left(\frac{x_{N-1} + 2x_N}{3}\right) + f(x_N) \right].
\end{aligned}$$

Reordenando términos en forma de sumas explícitas:

$$\begin{aligned}
I_{S3/8}(f) &= \frac{h}{8} \left[f(x_0) + 3 \sum_{i=1}^N f\left(\frac{2x_{i-1} + x_i}{3}\right) + 3 \sum_{i=1}^N f\left(\frac{x_{i-1} + 2x_i}{3}\right) \right. \\
&\quad \left. + 2 \sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) + f(x_N) \right].
\end{aligned}$$

Finalmente, sustituyendo $h = \frac{x_N - x_0}{N}$:

$$\boxed{
\begin{aligned}
I_{S3/8}(f) &= \frac{x_N - x_0}{8N} \left[f(x_0) + 3 \sum_{i=1}^N f\left(\frac{2x_{i-1} + x_i}{3}\right) \right. \\
&\quad \left. + 3 \sum_{i=1}^N f\left(\frac{x_{i-1} + 2x_i}{3}\right) + 2 \sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) + f(x_N) \right]
\end{aligned}
}$$

1.4. Método de Filon (Trapecio-Filon)

Filon para un segmento

El método de Filon aproxima integrales de la forma:

$$I = \int_{x_0}^{x_N} f(x) \cdot \text{kernel}(px) dx$$

mediante la expresión:

$$I_{\text{Fsegmento}} = \lambda_0 f(x_0) + \lambda_1 f(x_N)$$

Para determinar los coeficientes λ_0 y λ_1 , se impone que la fórmula sea exacta para los polinomios de grado 1. De esta forma, se obtiene el sistema:

$$\begin{aligned} \lambda_0 + \lambda_1 &= \int_{x_0}^{x_N} \text{kernel}(px) dx \\ \lambda_0 x_0 + \lambda_1 x_N &= \int_{x_0}^{x_N} x \cdot \text{kernel}(px) dx \end{aligned}$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones dependiendo del kernel específico, se obtiene la cuadratura:

$$I_{\text{Fsegmento}}(f) = \lambda_0^{c,s} f(x_0) + \lambda_1^{c,s} f(x_N)$$

Filon compuesto

Sea f continua en $[x_0, x_N]$, y sea $\{x_0, x_1, \dots, x_N\}$ un conjunto de $N+1$ nodos igualmente espaciados, con paso $h = \frac{x_N - x_0}{N}$, donde $x_i = x_0 + ih$.

Dividiendo la integral en N segmentos, se tiene

$$I(f) = \int_{x_0}^{x_N} f(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x) dx + \dots + \int_{x_{N-1}}^{x_N} f(x) dx$$

Aplicando el método de Filon en cada segmento:

$$I_{FC} = h [\lambda_{0'}^{c,s} f(x_0) + \lambda_{1''}^{c,s} f(x_1)] + [\lambda_{1'}^{c,s} f(x_1) + \lambda_{2''}^{c,s} f(x_2)] \\ + [\lambda_{2'}^{c,s} f(x_2) + \lambda_{3''}^{c,s} f(x_3)] + \cdots + [\lambda_{N-1'}^{c,s} f(x_{N-1}) + \lambda_{N''}^{c,s} f(x_N)]$$

Reordenando términos:

$$I_{FC} = h \left[\sum_{i=1}^N \lambda_{i-1'}^{c,s} f(x_{i-1}) + \sum_{i=1}^N \lambda_{i''}^{c,s} f(x_i) \right]$$

Finalmente, sustituyendo $h = \frac{x_N - x_0}{N}$:

$$I_F(f) = \frac{x_N - x_0}{N} \left[\sum_{i=1}^N \lambda_{i-1'}^{c,s} f(x_{i-1}) + \sum_{i=1}^N \lambda_{i''}^{c,s} f(x_i) \right]$$

1.5. Método de Simpson-Filon

Simpson-Filon para un segmento

El método de Simpson-Filon aproxima integrales de la forma

$$I = \int_{x_0}^{x_N} f(x) \cdot \text{kernel}(px) dx$$

mediante la expresión

$$I_{\text{SFsegmento}} = \lambda_0 f(x_0) + \lambda_1 f\left(\frac{x_0 + x_N}{2}\right) + \lambda_2 f(x_N).$$

Para determinar los coeficientes λ_0 , λ_1 y λ_2 , se impone que la fórmula sea exacta para polinomios de grado 2, obteniéndose el sistema

$$\lambda_0 + \lambda_1 + \lambda_2 = \int_{x_0}^{x_N} \text{kernel}(px) dx, \\ \lambda_0 x_0 + \lambda_1 \left(\frac{x_0 + x_N}{2}\right) + \lambda_2 x_N = \int_{x_0}^{x_N} x \text{kernel}(px) dx, \\ \lambda_0 x_0^2 + \lambda_1 \left(\frac{x_0 + x_N}{2}\right)^2 + \lambda_2 x_N^2 = \int_{x_0}^{x_N} x^2 \text{kernel}(px) dx.$$

Resolviendo el sistema según el kernel elegido ($\cos(px)$ o $\sin(px)$), se obtiene la cuadratura segmentaria:

$$I_{\text{SFsegmento}}(f) = \lambda_0^{c,s} f(x_0) + \lambda_1^{c,s} f\left(\frac{x_0 + x_N}{2}\right) + \lambda_2^{c,s} f(x_N)$$

Simpson-Filon compuesto

Sea f continua en $[x_0, x_N]$, y sea $\{x_0, x_1, \dots, x_N\}$ un conjunto de $N+1$ nodos igualmente espaciados, con paso $h = \frac{x_N - x_0}{N}$, donde $x_i = x_0 + ih$.

Dividiendo la integral en N segmentos, se tiene

$$I(f) = \int_{x_0}^{x_N} f(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x) dx + \dots + \int_{x_{N-1}}^{x_N} f(x) dx$$

y aplicando Simpson-Filon en cada segmento, se tiene

$$\begin{aligned} I_{SF}(f) = h & \left[\lambda_0^{c,s} f(x_0) + \lambda_1^{c,s} f\left(\frac{x_0 + x_1}{2}\right) + \lambda_2^{c,s} f(x_1) \right. \\ & + \lambda_1^{c,s} f(x_1) + \lambda_2^{c,s} f\left(\frac{x_1 + x_2}{2}\right) + \lambda_3^{c,s} f(x_2) \\ & + \dots + \\ & \left. + \lambda_{N-1}^{c,s} f(x_{N-1}) + \lambda_N^{c,s} f\left(\frac{x_{N-1} + x_N}{2}\right) + \lambda_{N+1}^{c,s} f(x_N) \right]. \end{aligned}$$

Reordenando términos de forma compacta:

$$I_{SF}(f) = h \left[\sum_{i=1}^N \lambda_{i-1}^{c,s} f(x_{i-1}) + \sum_{i=1}^N \lambda_{i''}^{c,s} f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right) + \sum_{i=1}^N \lambda_{i+1}^{c,s} f(x_i) \right]$$

. Finalmente, sustituyendo $h = \frac{x_N - x_0}{N}$:

$$I_{SF}(f) = \frac{x_N - x_0}{N} \left[\sum_{i=1}^N \lambda_{i-1}^{c,s} f(x_{i-1}) + \sum_{i=1}^N \lambda_{i''}^{c,s} f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right) + \sum_{i=1}^N \lambda_{i+1}^{c,s} f(x_i) \right]$$

1.6. Método de Simpson_{3/8}-Filon

Simpson_{3/8}-Filon para un segmento

$$I = \int_{x_0}^{x_N} f(x) \cdot \text{kernel}(px) dx$$

mediante:

$$I_{S3/8-Fsegmento} = \lambda_0 f(x_0) + \lambda_1 f\left(\frac{2x_0 + x_N}{3}\right) + \lambda_2 f\left(\frac{x_0 + 2x_N}{3}\right) + \lambda_3 f(x_N)$$

Los coeficientes se determinan imponiendo exactitud para polinomios hasta grado 3:

$$\begin{aligned}\lambda_0 + \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 &= \int_{x_0}^{x_N} \text{kernel}(px) dx, \\ \lambda_0 x_0 + \lambda_1 \left(\frac{2x_0 + x_N}{3}\right) + \lambda_2 \left(\frac{x_0 + 2x_N}{3}\right) + \lambda_3 x_N &= \int_{x_0}^{x_N} x \text{kernel}(px) dx, \\ \lambda_0 x_0^2 + \lambda_1 \left(\frac{2x_0 + x_N}{3}\right)^2 + \lambda_2 \left(\frac{x_0 + 2x_N}{3}\right)^2 + \lambda_3 x_N^2 &= \int_{x_0}^{x_N} x^2 \text{kernel}(px) dx, \\ \lambda_0 x_0^3 + \lambda_1 \left(\frac{2x_0 + x_N}{3}\right)^3 + \lambda_2 \left(\frac{x_0 + 2x_N}{3}\right)^3 + \lambda_3 x_N^3 &= \int_{x_0}^{x_N} x^3 \text{kernel}(px) dx.\end{aligned}$$

Resolviendo el sistema según el kernel específico ($\cos(px)$ o $\sin(px)$), obtenemos la cuadratura segmentaria final:

$$I_{S3/8-Fsegmento}(f) = \lambda_0^{c,s} f(x_0) + \lambda_1^{c,s} f\left(\frac{2x_0 + x_N}{3}\right) + \lambda_2^{c,s} f\left(\frac{x_0 + 2x_N}{3}\right) + \lambda_3^{c,s} f(x_N).$$

Simpson_{3/8}-Filon compuesto

Sea f continua en $[x_0, x_N]$, y sea $\{x_0, x_1, \dots, x_N\}$ un conjunto de $N+1$ nodos igualmente espaciados, con paso $h = \frac{x_N - x_0}{N}$, donde $x_i = x_0 + ih$.

Dividiendo la integral en N segmentos, se tiene

$$I(f) = \int_{x_0}^{x_N} f(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x) dx + \cdots + \int_{x_{N-1}}^{x_N} f(x) dx$$

y aplicando Simpson_{3/8}-Filon en cada segmento:

$$\begin{aligned} I_{S3/8F}(f) = h & \left[\lambda_{0'}^{c,s} f(x_0) + \lambda_{1''}^{c,s} f\left(\frac{2x_0+x_1}{3}\right) + \lambda_{2''' }^{c,s} f\left(\frac{x_0+2x_1}{3}\right) + \lambda_{3''''}^{c,s} f(x_1) \right. \\ & + \lambda_{1'}^{c,s} f(x_1) + \lambda_{2''}^{c,s} f\left(\frac{2x_1+x_2}{3}\right) + \lambda_{3'''}^{c,s} f\left(\frac{x_1+2x_2}{3}\right) + \lambda_{4''''}^{c,s} f(x_2) \\ & + \cdots + \\ & \left. \lambda_{N-1'}^{c,s} f(x_{N-1}) + \lambda_{N''}^{c,s} f\left(\frac{2x_{N-1}+x_N}{3}\right) + \lambda_{N+1'''}^{c,s} f\left(\frac{x_{N-1}+2x_N}{3}\right) + \lambda_{N+2''''}^{c,s} f(x_N) \right]. \end{aligned}$$

Reordenando y agrupando en sumas compactas:

$$\begin{aligned} I_{S3/8F}(f) = h & \left[\sum_{i=1}^N \lambda_{i-1'}^{c,s} f(x_{i-1}) + \sum_{i=1}^N \lambda_{i''}^{c,s} f\left(\frac{2x_{i-1}+x_i}{3}\right) \right. \\ & \left. + \sum_{i=1}^N \lambda_{i+1'''}^{c,s} f\left(\frac{x_{i-1}+2x_i}{3}\right) + \sum_{i=1}^N \lambda_{i+2''''}^{c,s} f(x_i) \right] \end{aligned}$$

Finalmente, sustituyendo $h = \frac{x_N-x_0}{N}$:

$$\boxed{I_{S3/8F}(f) = \frac{x_N - x_0}{N} \left[\sum_{i=1}^N \lambda_{i-1'}^{c,s} f(x_{i-1}) + \sum_{i=1}^N \lambda_{i''}^{c,s} f\left(\frac{2x_{i-1}+x_i}{3}\right) + \sum_{i=1}^N \lambda_{i+1'''}^{c,s} f\left(\frac{x_{i-1}+2x_i}{3}\right) + \sum_{i=1}^N \lambda_{i+2''''}^{c,s} f(x_i) \right]}$$

Kernels y notación de coeficientes en los métodos de Filon

Un aspecto esencial de los métodos de tipo Filon es la presencia de un *kernel oscilatorio* que modula la integral a calcular. En general, este kernel se toma como

$$\text{kernel}(px) = \cos(px) \quad \text{o bien} \quad \text{kernel}(px) = \sin(px),$$

dependiendo de la aplicación específica.

La estructura de las fórmulas de cuadratura derivadas de Filon es independiente de esta elección; sin embargo, los coeficientes asociados a los nodos cambian de manera explícita en función del kernel considerado. Para reflejar esta dependencia se adopta la notación

$$\lambda^c \quad \text{para el kernel } \cos(px), \quad \lambda^s \quad \text{para el kernel } \sin(px),$$

y, cuando no es necesario distinguir entre ambos casos, se emplea la notación abreviada $\lambda^{c,s}$.

Bajo este convenio, cualquier esquema de cuadratura de Filon puede escribirse de forma genérica como

$$I_{\text{Filon}}(f) \approx \sum_{i=0}^n \lambda_i^{c,s} f(x_i),$$

donde los coeficientes $\lambda_i^{c,s}$ dependen tanto del kernel seleccionado como del tipo de interpolación adoptado (lineal, cuadrática, cúbica, etc.), pero la estructura de la fórmula permanece invariante.

Este marco notacional permite presentar de manera unificada las distintas variantes del método de Filon, como las basadas en interpolación lineal (trapecio), cuadrática (Simpson) o cúbica (Simpson 3/8). En todos los casos, la diferencia esencial radica únicamente en la expresión explícita de los coeficientes $\lambda_i^{c,s}$, los cuales se calculan a partir de integrales que involucran el kernel elegido.

2. Más métodos numéricos

En esta sección se presentan otros métodos numéricos de integración que fueron desarrollados durante el presente trabajo. En particular, se incluyen versiones creadas y programadas desde cero de los métodos *Trapecio–Filon* y *Simpson – Filon*, formulados siguiendo la misma lógica conceptual em-

pleada para construir el método de *Simpson_{3/8}-Filon* descrito previamente. También se consideran los métodos clásicos de integración de *Simpson* y *Simpson_{3/8}*, empleados como referencia para evaluar la precisión de las aproximaciones obtenidas.

Todos estos métodos se aplicaron a los sistemas cuánticos de la partícula en una caja y del oscilador armónico confinado, tanto en su estado basal como en un su primer estado excitado ($n = 2$) para PIAB y para el HOC ($n = 1$). El análisis correspondiente permite contrastar el comportamiento numérico en distintos estados energéticos y comparar su desempeño frente a esquemas especializados en integrales altamente oscilatorias.

Cuadraturas utilizadas

En esta sección se presentan las fórmulas de cuadratura implementadas para evaluar numéricamente la transformada de Dirac-Fourier (TDF) en sistemas cuánticos unidimensionales confinados. Elaborados de forma autónoma desde su base teórica hasta su implementación computacional las reglas de integración trapecio-Filon y Simpson-Filon, adecuadas para manejar integrales altamente oscilatorias con el kernel $\cos(px)$ y $\sin(px)$. Asimismo, se utilizaron como referencia las reglas clásicas de Simpson y Simpson_{3/8}, tanto en sus estados basales como su primer estado excitado, en los sistemas de partícula en una caja y oscilador armónico confinado.

Cuadratura Filon (Trapecio-Filon)

El método de Filon aproxima integrales de la forma

$$I = \int_{x_0}^{x_N} f(x) \text{kernel}(px) dx$$

mediante la expresión lineal

$$I_{\text{Fsegmento}} = \lambda_0 f(x_0) + \lambda_1 f(x_N).$$

Para determinar los coeficientes, se impone que la fórmula sea exacta para polinomios de grado 1, lo que conduce a los siguientes sistemas de ecuaciones:

$$\text{Para } \cos(px) : \begin{cases} \lambda_0^c + \lambda_1^c = \int_{x_0}^{x_N} \cos(px) dx, \\ \lambda_0^c x_0 + \lambda_1^c x_N = \int_{x_0}^{x_N} x \cos(px) dx \end{cases}$$

$$\text{Para } \sin(px) : \begin{cases} \lambda_0^s + \lambda_1^s = \int_{x_0}^{x_N} \sin(px) dx, \\ \lambda_0^s x_0 + \lambda_1^s x_N = \int_{x_0}^{x_N} x \sin(px) dx \end{cases}$$

Resolviendo estos sistemas se obtiene la cuadratura de Filon para cada kernel:

$$I_{\text{Fsegmento}}^c(f) = \lambda_0^c f(x_0) + \lambda_1^c f(x_N), \quad I_{\text{Fsegmento}}^s(f) = \lambda_0^s f(x_0) + \lambda_1^s f(x_N).$$

- Para el kernel $\cos(px)$:

Para $\lambda_{\alpha c}$

$$\lambda_{\alpha c} = \frac{\cos(px_0) - \cos(px_N) + px_0 \sin(px_0) - px_N \sin(px_0)}{p^2(x_0 - x_N)}$$

Para $\lambda_{\beta c}$

$$\lambda_{\beta c} = \frac{-\cos(px_0) + \cos(px_N) - px_0 \sin(px_N) + px_N \sin(px_N)}{p^2(x_0 - x_N)}.$$

- Para el kernel $\sin(px)$:

Para $\lambda_{\alpha s}$

$$\lambda_{\alpha s} = \frac{-px_0 \cos(px_0) + px_N \cos(px_0) + \sin(px_0) - \sin(px_N)}{p^2(x_0 - x_N)}$$

Para $\lambda_{\beta s}$

$$\lambda_{\beta s} = \frac{px_0 \cos(px_N) - px_N \cos(px_0) - \sin(px_0) + \sin(px_N)}{p^2(x_0 - x_N)}$$

Si se desea emplear la cuadratura compuesta, ésta se presenta en el primer capítulo del Apéndice, bajo la denominación *Filon-Compuesta*. Para su aplicación, basta con reemplazar los nodos x_0 y x_N por x_{i-1} y x_i , respectivamente, tanto en los términos de evaluación de la función como en los coeficientes λ^c y λ^s .

Cuadratura Simpson-Filon

Oscilador armónico confinado HOC Para integrales oscilatorias

$$I = \int_{x_0}^{x_N} f(x) \text{kernel}(px) dx, \quad \text{kernel}(px) = \sin(px) \text{ o } \cos(px),$$

los coeficientes $\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2$ se determinan imponiendo exactitud para polinomios de grado 2:

$$\text{Para } \cos(px) : \begin{cases} \lambda_0^c + \lambda_1^c + \lambda_2^c = \int_{x_0}^{x_N} \cos(px) dx, \\ \lambda_0^c x_0 + \lambda_1^c \frac{x_0+x_N}{2} + \lambda_2^c x_N = \int_{x_0}^{x_N} x \cos(px) dx, \\ \lambda_0^c x_0^2 + \lambda_1^c \left(\frac{x_0+x_N}{2}\right)^2 + \lambda_2^c x_N^2 = \int_{x_0}^{x_N} x^2 \cos(px) dx \end{cases}$$

$$\text{Para } \sin(px) : \begin{cases} \lambda_0^s + \lambda_1^s + \lambda_2^s = \int_{x_0}^{x_N} \sin(px) dx, \\ \lambda_0^s x_0 + \lambda_1^s \frac{x_0+x_N}{2} + \lambda_2^s x_N = \int_{x_0}^{x_N} x \sin(px) dx, \\ \lambda_0^s x_0^2 + \lambda_1^s \left(\frac{x_0+x_N}{2}\right)^2 + \lambda_2^s x_N^2 = \int_{x_0}^{x_N} x^2 \sin(px) dx \end{cases}$$

La cuadratura segmentaria queda:

$$I_{\text{SFsegmento}}^c(f) = \lambda_0^c f(x_0) + \lambda_1^c f\left(\frac{x_0 + x_N}{2}\right) + \lambda_2^c f(x_N)$$

$$I_{\text{SFsegmento}}^s(f) = \lambda_0^s f(x_0) + \lambda_1^s f\left(\frac{x_0 + x_N}{2}\right) + \lambda_2^s f(x_N)$$

- Para el kernel $\sin(px)$:

Para $\lambda_0 s$

$$\lambda_0 s = \frac{1}{p^3(x_0 - x_N)^2} \left((p^2(x_0 - x_N)^2 - 4) \cos(px_0) - p(x_0 - x_N)(3 \sin(px_0) + \sin(px_N)) + 4 \cos(px_N) \right)$$

Para $\lambda_1 s$

$$\lambda_1 s = \frac{1}{p^3(x_0 - x_N)^2} \left(4p(x_0 - x_N)(\sin(px_0) + \sin(px_N)) + 8 \cos(px_0) - 8 \cos(px_N) \right),$$

Para $\lambda_2 s$

$$\lambda_2 s = \frac{1}{p^3(x_0 - x_N)^2} \left(-4 \cos(px_0) + 4 \cos(px_N) - p(x_0 - x_N)(\sin(px_0) + 3 \sin(px_N)) - p^2(x_0 - x_N)^2 \cos(px_N) \right).$$

- Para el kernel $\cos(px)$:

Para $\lambda_0 c$

$$\lambda_0 c = \frac{1}{p^3(x_0 - x_N)^2} \left(4(\sin(px_0) - \sin(px_N)) - p(x_0 - x_N)[p(x_0 - x_N) \sin(px_0) + 3 \cos(px_0) + \cos(px_N)] \right)$$

Para $\lambda_1 c$

$$\lambda_1 c = \frac{1}{p^3(x_0 - x_N)^2} \left(-8 \sin(px_0) + 8 \sin(px_N) \right. \\ \left. + 4p(x_0 - x_N)(\cos(px_0) + \cos(px_N)) \right)$$

Para $\lambda_2 c$

$$\lambda_2 c = \frac{1}{p^3(x_0 - x_N)^2} \left(4(\sin(px_0) - \sin(px_N)) + p(x_0 - x_N) \right. \\ \left. [p(x_0 - x_N) \sin(px_N) - \cos(px_0) - 3 \cos(px_N)] \right)$$

Si se desea emplear la cuadratura compuesta de Simpson-Filon, ésta se presenta en el primer capítulo del Apéndice bajo la denominación *Simpson-Filon Compuesta*. Para su aplicación, basta con reemplazar los nodos x_0 , $\frac{x_0+x_N}{2}$ y x_N por x_{i-1} , $\frac{x_{i-1}+x_i}{2}$ y x_i , respectivamente, tanto en los términos de evaluación de la función como en los coeficientes λ^c y λ^s .

En esta sección se presenta la cuadratura de Filon y la de Simpson-Filon. En la sección siguiente se mostrarán los resultados obtenidos con estas cuadraturas, así como con las fórmulas clásicas de Simpson y Simpson_{3/8}, las cuales se encuentran descritas en el primer capítulo del Apéndice bajo las denominaciones *Simpson* y *Simpson 3/8*.

2.1. Métodos aplicados a la PIAB

Para su estado basal $n=1$

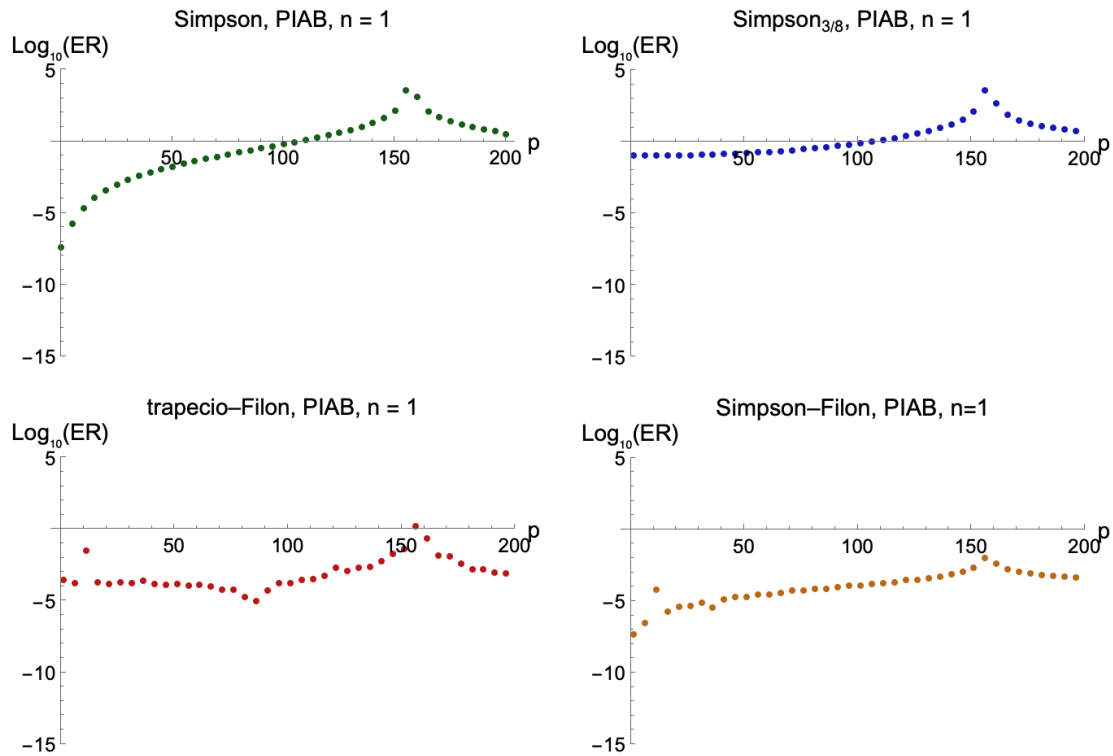


Figura 1: Transformada de Fourier para el estado basal ($n = 1$) de PIAB con $N = 50$ particiones. Se comparan los métodos de integración: Simpson clásico, Simpson $_{3/8}$, Trapecio-Filon y Simpson-Filon.

A partir de la gráfica [1](#) obtenida para el estado basal ($n = 1$) de la partícula en una caja con $N = 50$ particiones, se observa que los métodos clásicos de Simpson y Simpson $_{3/8}$ no son adecuados para evaluar integrales altamente oscilatorias. Ambos métodos presentan resultados poco confiables al incrementarse p , mostrando comportamientos que se desvían de la tendencia esperada. En contraste, los métodos Trapecio-Filon y Simpson-Filon muestran un mejor desempeño general. Sin embargo, sus resultados aún presentan ciertas inconsistencias respecto al comportamiento deseado, por lo que, aunque son más apropiados para este tipo de problemas.

Para su primer estado excitado $n=2$

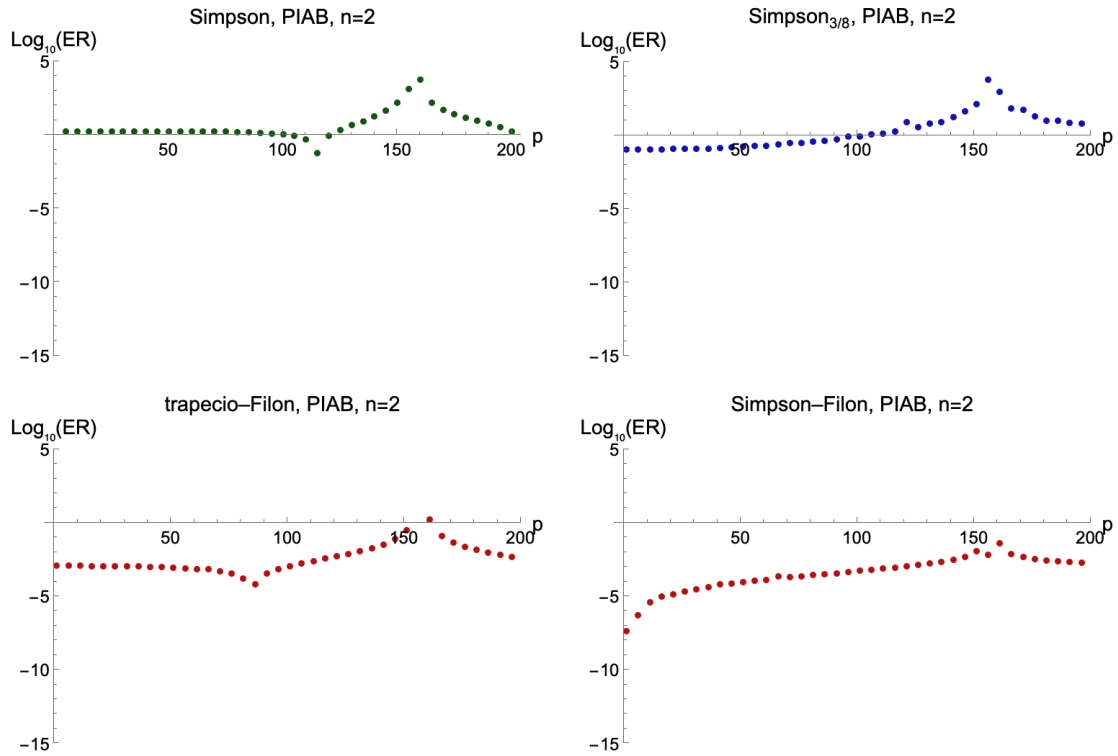


Figura 2: Transformada de Fourier para el su primer estado excitado ($n = 2$) de PIAB con $N = 50$ particiones. Se comparan los métodos de integración: Simpson clásico, Simpson $_{3/8}$, Trapecio-Filon y Simpson-Filon.

En la imagen anterior [2](#) Se muestran los resultados para el primer estado excitado ($n = 2$) de la partícula en una caja con $N = 50$ particiones, se observa nuevamente que los métodos de Simpson y Simpson $_{3/8}$ resultan inadecuados para tratar integrales altamente oscilatorias, ya que sus resultados se desvían significativamente del comportamiento esperado. En este caso, el aumento en el número cuántico implica una mayor frecuencia en la función a transformar, lo que introduce más oscilaciones y acentúa las limitaciones de los métodos clásicos. Por otro lado, los métodos Trapecio-Filon y Simpson-Filon mantienen un desempeño relativamente mejor, aunque siguen presentando ciertas inconsistencias.

2.2. Métodos aplicados a la HOC

Para su estado basal $n=0$

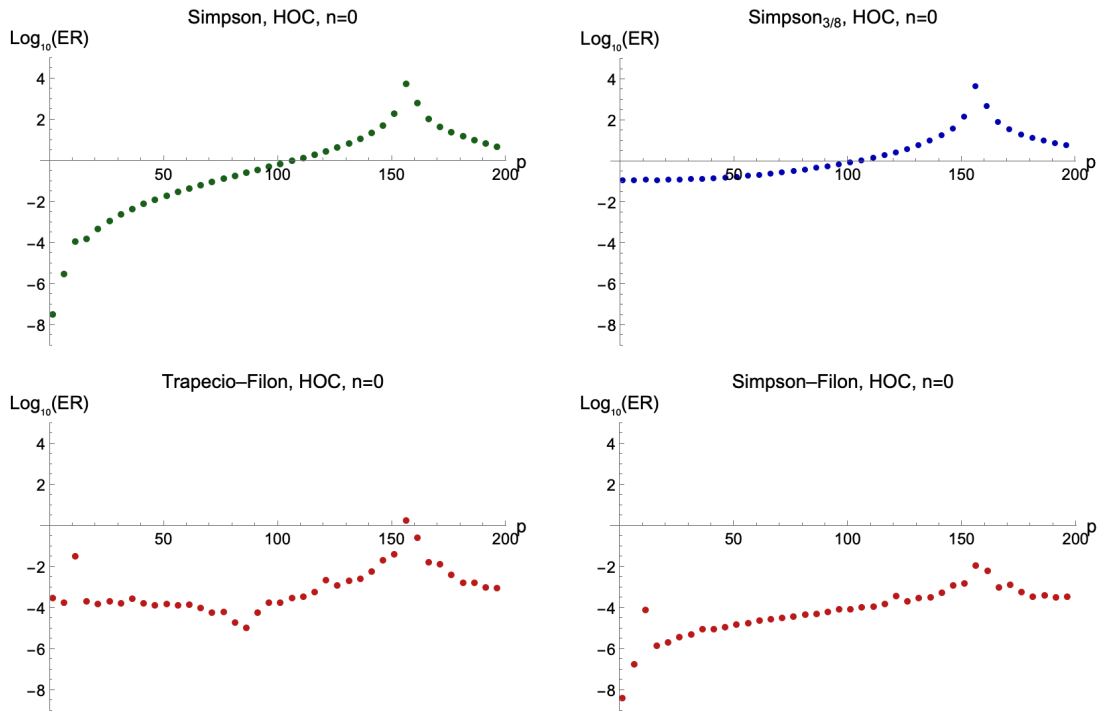


Figura 3: Transformada de Fourier para el estado basal ($n = 0$) de HOC con $N = 50$ particiones. Se comparan los métodos de integración: Simpson clásico, Simpson_{3/8}, Trapecio-Filon y Simpson-Filon.

Las gráficas anteriores, mostradas en la figura [3](#), presentan los resultados correspondientes al estado basal del oscilador armónico confinado con $N = 50$ particiones. Se observa que los métodos clásicos de Simpson y Simpson_{3/8} no resultan adecuados para evaluar integrales altamente oscilatorias, pues sus resultados se desvían de la tendencia esperada conforme aumenta p . En cambio, los métodos Trapecio-Filon y Simpson-Filon muestran un mejor desempeño general, aunque todavía presentan algunas inconsistencias respecto al comportamiento deseado. Por lo tanto, aunque estos métodos son más apropiados para tratar integrales oscilatorias en sistemas confinados, no alcanzan completamente la precisión deseada.

Para su primer estado excitado $n=1$

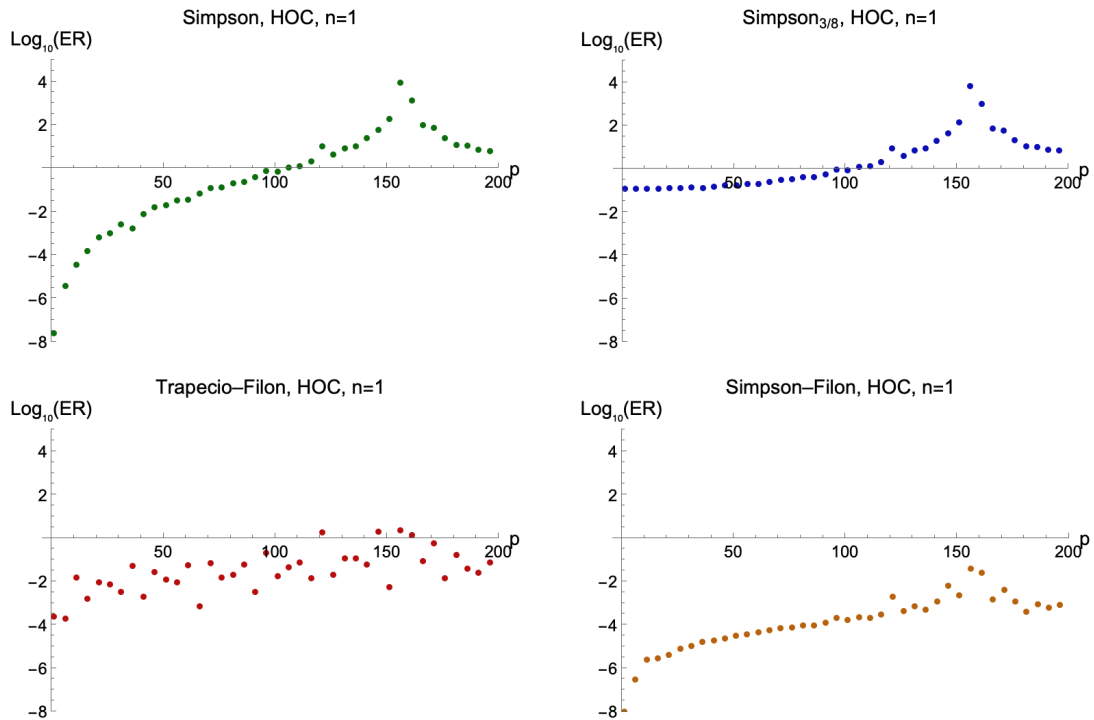


Figura 4: Transformada de Fourier para el su primer estado excitado ($n = 1$) de HOC con $N = 50$ particiones. Se comparan los métodos de integración: Simpson clásico, Simpson $_{3/8}$, Trapecio-Filon y Simpson-Filon.

Las gráficas correspondientes [4](#) al primer estado excitado del oscilador armónico confinado, con $N = 50$ particiones, muestran un comportamiento similar al observado en el estado basal. Los métodos clásicos de Simpson y Simpson $_{3/8}$ continúan mostrando resultados poco fiables para integrales altamente oscilatorias, desviándose notablemente de la tendencia esperada conforme aumenta p . Esto se acentúa debido a la mayor frecuencia de oscilaciones propias del estado excitado. Por su parte, los métodos Trapecio-Filon y Simpson-Filon mantienen un mejor desempeño general, aunque persisten ciertas inconsistencias con respecto al comportamiento deseado.

3. Análisis según el número de subintervalos

N

El objetivo de esta sección es presentar y justificar la elección del número de subintervalos $N = 50$ para la implementación de los métodos numéricos utilizados en esta tesis. Para ello, se realiza un análisis comparativo empleando valores mayores de N , en el rango de 100 a 200, aplicados a dos sistemas cuánticos confinados: la partícula en una caja y el oscilador armónico cuántico confinado.

Los resultados obtenidos con distintos valores de N se presentan en tablas, lo que permite evaluar la influencia del número de subintervalos en la precisión de los métodos numéricos. En esta sección se presentan los resultados correspondientes a la partícula en una caja con número cuántico $n = 1$ y $n = 5$.

3.1. Partícula en una caja

Caso $n = 1$

En el cuadro [1](#) se muestran los errores relativos calculados para distintos valores del parámetro p , utilizando tres valores de subintervalos $N = 50, 100, 200$ y tres métodos numéricos diferentes para PIAB.

Cuadro 1: Errores relativos para la partícula en una caja con $n = 1$, distintos valores de p , subintervalos N y métodos numéricos.

2^*p	$N = 50$			$N = 100$			$N = 200$		
	$S_{3/8}$ -F	CC	CCF	$S_{3/8}$ -F	CC	CCF	$S_{3/8}$ -F	CC	CCF
10	-6.8154	-4.1473	-9.9735	-6.6141	-7.3794	-9.6609	-6.7132	-7.3794	-10.2231
20	-6.8204	-4.1681	-10.9312	-5.9283	-7.8147	-10.6212	-6.0389	-7.8147	-11.1833
30	-5.4365	-4.5945	-11.3442	-4.8994	-7.8459	-11.0424	-5.6559	-7.8459	-11.6060
40	-5.6390	-3.1668	-14.1922	-6.4805	-7.8518	-12.5888	-5.6089	-7.8518	-13.1237
50	-5.4961	-3.3744	-12.8030	-5.7462	-7.8539	-13.1115	-5.8728	-7.8539	-13.7896
60	-5.6561	-3.3112	-12.7257	-5.6108	-7.8549	-12.9511	-6.3363	-7.8548	-13.6345
70	-5.1295	-3.2132	-12.6418	-5.8257	-7.8554	-12.9474	-5.6411	-7.8554	-13.7236
80	-4.1575	-3.0747	-12.0932	-5.7449	-7.9059	-12.8700	-4.3644	-7.8625	-14.1616
90	-5.0253	0.0590	-13.4257	-5.2433	-4.2319	-13.2066	-5.1700	-4.9363	-13.6521
100	-5.3320	2.1244	-13.1833	-5.2947	-2.1196	-13.0882	-5.6511	-2.6799	-13.8411
110	-4.9531	3.3454	-12.9959	-5.1975	-0.8575	-13.0891	-5.2332	-1.2477	-13.7462
120	-5.9301	2.9567	-12.8400	-5.6381	-1.1997	-13.1186	-5.5862	-2.4631	-14.1057
130	-4.9012	3.1693	-12.5646	-4.3048	-0.9658	-13.1594	-4.6187	-1.0678	-13.5073
140	-4.9165	3.4940	-12.5351	-4.5202	-0.6066	-12.9258	-5.3612	-0.7687	-13.1947
150	-4.7709	3.5652	-14.5291	-4.4604	-0.5120	-13.1141	-5.9649	-0.4917	-13.4877
160	-4.5501	2.3110	-13.3754	-5.0726	-1.6703	-13.1597	-4.8158	-1.2603	-13.7309
170	-4.8586	2.8980	-13.1490	-4.8060	-1.1165	-13.2356	-4.9230	-1.4172	-13.9459
180	-4.6487	1.4334	-12.8718	-4.8521	-1.5670	-13.8303	-4.5838	-1.2879	-15.5336
190	-3.8101	2.9848	-12.1788	-4.7836	1.0985	-12.6210	-3.4452	-1.0541	-12.6210
200	-4.6647	2.7518	-13.5332	-5.1917	3.8658	-12.8181	-4.1126	-1.2962	-13.4107

Observamos que:

- Para el método $Simpson_{3/8}$ -Filon, el cambio en los resultados al aumentar N es pequeño, indicando una buena convergencia incluso con $N = 50$. Esto sugiere que aumentar el número de subintervalos no aporta una mejora significativa en la precisión para este método, pero sí incrementa el costo computacional.
- En contraste, el método Clenshaw-Curtis muestra variaciones más pronunciadas al modificar N , pero los resultados no son tan precisos cuando p es grande, lo que limita su utilidad práctica para este caso. Por esta

razón, se opta por no aumentar N excesivamente para este método.

- El método Clenshaw-Curtis-Filon presenta una mejora en la precisión conforme se incrementa N , pero dicha mejora es moderada y no justifica el incremento considerable en el costo computacional al ir más allá de $N = 50$.

Por lo tanto, para balancear eficiencia y precisión, se selecciona $N = 50$ como valor óptimo para el desarrollo de los cálculos en esta tesis, reduciendo así el tiempo computacional sin comprometer la calidad de los resultados.

Caso $n = 5$

En esta sección se presentan los resultados numéricos obtenidos para la partícula en una caja con número cuántico $n = 5$. Se evaluaron tres métodos numéricos diferentes: Simpson_{3/8}-Filon ($S_{3/8}$ -F), Clenshaw-Curtis (CC) y Clenshaw-Curtis-Filon (CCF), para diferentes cantidades de subintervalos $N = 50, 100, 200$.

La tabla [2](#) muestra los errores relativos calculados para distintos valores del parámetro p .

Cuadro 2: Errores relativos para la partícula en una caja con $n = 5$, distintos valores de p , subintervalos N y métodos numéricos.

2^*p	$N = 50$			$N = 100$			$N = 200$		
	$S_{3/8}$ -F	CC	CCF	$S_{3/8}$ -F	CC	CCF	$S_{3/8}$ -F	CC	CCF
10	-5.7755	-3.8781	-7.6322	-6.5476	-7.3794	-7.6322	-6.7079	-7.3794	-7.6322
20	-5.5663	-4.3710	-6.5152	-5.9078	-6.9850	-6.5152	-5.9045	-6.9850	-6.5152
30	-5.7633	-4.9110	-8.9249	-5.2644	-7.6187	-8.9249	-5.2871	-7.6187	-8.9249
40	-6.5217	-3.1693	-6.3042	-6.1082	-7.7445	-6.3042	-5.9790	-7.7445	-6.3042
50	-5.7421	-3.3818	-7.4124	-7.0318	-7.7919	-7.4124	-6.2416	-7.7919	-7.4124
60	-6.2669	-3.3178	-7.6967	-6.1285	-7.8147	-7.6967	-6.9970	-7.8147	-7.6966
70	-5.4297	-3.2189	-7.4601	-5.7590	-7.8272	-7.4601	-5.7505	-7.8273	-7.4601
80	-5.0898	-2.6081	-6.8932	-4.5416	-7.1740	-6.8932	-4.7891	-9.5615	-6.8932
90	-5.9523	1.0344	-7.8413	-5.2199	-3.2244	-7.8413	-5.1576	-3.8336	-7.8413
100	-5.6456	2.3278	-8.8159	-5.4534	-1.8860	-8.8159	-6.7814	-2.3323	-8.8159
110	-5.3078	2.0701	-8.8814	-6.3724	-2.1130	-8.8814	-6.1094	-2.1440	-8.8814
120	-4.8957	2.6960	-8.5992	-5.5183	-1.4772	-8.5992	-5.7942	-1.8746	-8.5992
130	-4.4125	2.3135	-8.3602	-5.5141	-1.8851	-8.3602	-4.8689	-1.9127	-8.3602
140	-4.0596	2.5043	-8.5043	-4.9191	-1.7255	-8.5043	-4.8575	-1.8641	-8.5043
150	-2.5162	2.8669	-9.2620	-5.3423	-1.1642	-9.2620	-5.3411	-1.0510	-9.2620
160	-3.0818	2.3351	-8.9677	-5.5385	-1.7306	-8.9677	-5.4731	-1.6891	-8.9677
170	-3.2960	2.6652	-8.8857	-5.5359	-1.3466	-8.8857	-5.5359	-1.6165	-8.8857
180	-3.8930	1.8949	-8.8198	-4.9821	-0.7434	-8.8198	-4.9821	-1.4962	-8.8198
190	-3.7276	2.8491	-8.3887	-4.1024	1.4731	-8.3887	-4.1314	-1.1763	-8.3887
200	-4.4270	1.5935	-9.0430	-4.8321	3.7573	-9.0430	-4.8321	-2.3401	-9.0430

Observamos que:

- **Método Simpson3/8-Filon (S3/8-F):** Los errores relativos para este método se mantienen bastante estables al incrementar N , con variaciones moderadas que no justifican un aumento significativo en el número de subintervalos. Esto sugiere que con $N = 50$ ya se alcanza una buena precisión, lo que es favorable para reducir el costo computacional.
- **Método Clenshaw-Curtis (CC):** Los resultados muestran una marcada sensibilidad al valor de N , con variaciones notorias entre $N = 50$, 100 y 200. Aunque el aumento de N proporciona una mejora considera-

ble en la precisión, esta se aprecia principalmente para valores pequeños del parámetro p . Sin embargo, en la mayoría de los casos dicha mejora no compensa el incremento en el costo computacional, por lo que se adopta $N = 50$ como un valor equilibrado que conserva una precisión aceptable y reduce el tiempo de cálculo.

- **Método Clenshaw-Curtis-Filon (CCF):** Aunque en la tabla no se aprecian diferencias evidentes al incrementar N , estas existen y se presentan únicamente en valores extremadamente pequeños, del orden de miles de milésimas o menores. Debido a que dichas variaciones son prácticamente imperceptibles y no impactan de forma significativa la precisión, se justifica la elección de $N = 50$ como valor óptimo, evitando así un aumento innecesario en el costo computacional.

Por lo tanto, considerando la relación entre precisión y costo computacional, se confirma que seleccionar $N = 50$ es adecuado para el desarrollo de los cálculos en esta tesis.

De forma análoga, para el caso del oscilador armónico cuántico confinado, el análisis de los resultados obtenidos con distintos valores de N muestra un comportamiento similar al observado en la partícula en una caja. Por esta razón, y considerando el costo computacional adicional que implicaría aumentar N , se mantiene la elección de $N = 50$ como valor de referencia para todos los cálculos.

4. Método Clenshaw-Curtis-Filon CCF y sus implicaciones.

En esta sección se analiza el rendimiento y las precisiones del método Clenshaw-Curtis-Filon (CCF) aplicado a la evaluación numérica de integrales altamente oscilatorias, así como las causas que originan errores y pérdidas de precisión en ciertos casos.

El análisis se enfoca principalmente en dos aspectos fundamentales: el cálculo de los coeficientes a_k y de los coeficientes ω_k , los cuales son componentes esenciales en la construcción del método y en la precisión de los resultados obtenidos.

4.1. Análisis de a_k

Para comprender mejor el comportamiento y la precisión del método Clenshaw-Curtis-Filon, es importante analizar las a_k , los cuales se obtienen a partir de las funciones de onda del sistema. Para el caso de la partícula en una caja, definidas como

$$\psi_n(\theta, k) = \sin\left(\frac{n\pi}{2}(\cos\theta + 1)\right) \cdot \cos(k\theta),$$

donde tanto n como k contribuyen a generar integrales altamente oscilatorias que deben evaluarse numéricamente.

La Figura 5 muestra dichas funciones de onda transformadas mediante el cambio de variable $x = \cos\theta$ para distintos valores del número cuántico n y del parámetro k . Estas gráficas permiten visualizar cómo la frecuencia y complejidad de las oscilaciones, moduladas por $\cos(k\theta)$, afectan la precisión del método numérico.

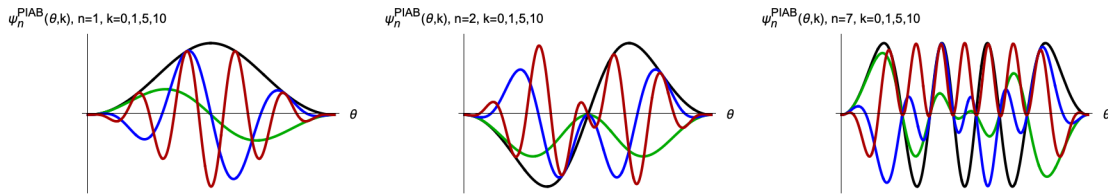


Figura 5: Comportamiento de las funciones de onda $\psi_n(\theta, k)$ del sistema PIAB transformadas mediante el cambio de variable $x = \cos\theta$, para distintos valores de n ($n = 1, 2, 7$) y factores del tipo $\cos(k\theta)$ ($k = 0$ (color negro), 1 (color verde), 5 (color azul) y 10 (color rojo)).

En particular, se observa que la oscilación de la función aumenta tanto con el número cuántico n como con k : un valor más alto de n incrementa el

número de nodos en la función base, mientras que un k mayor introduce oscilaciones adicionales moduladas por el término $\cos(k\theta)$. Estas gráficas ilustran cómo la transformación al espacio θ , junto con la incorporación de términos oscilatorios, modifica el perfil de la función de onda. Este análisis es fundamental para comprender el comportamiento de la transformada de Fourier en sistemas cuánticos confinados. En particular, se observa que la oscilación de la función aumenta tanto con el número cuántico n como con k : un valor más alto de n incrementa el número de nodos en la función base, mientras que un k mayor introduce oscilaciones adicionales moduladas por el término $\cos(k\theta)$.

Posteriormente, en la siguiente subsección se analizará el cálculo de los coeficientes a_k mediante diferentes métodos de integración numérica, con el objetivo de evaluar si alguna de estas alternativas mejora la precisión del cálculo. Cabe destacar que en los resultados principales de esta tesis, las a_k se obtuvieron utilizando la regla del trapecio compuesta. Por tanto, esta subsección explora si la adopción de otros métodos puede contribuir a obtener resultados más precisos. Cálculo numérico de los coeficientes a_k

Para analizar el origen de las limitaciones que presenta el método Clenshaw-Curtis-Filon (CCF) en ciertos casos, es fundamental examinar el cálculo numérico de las a_k . En este apéndice se muestran tres métodos distintos para la evaluación de la integral correspondiente, utilizando:

1. Regla del trapecio.
2. Método de Simpson 3/8.
3. Método de Simpson 3/8-Filon.

En todos los casos, los resultados corresponden al logaritmo en base 10 del error relativo ($\log_{10} \text{ER}$), calculado a partir de los valores analíticos para diferentes valores de p , con $N = 50$ y $\omega_{2k} = 10$.

La Tabla 3 presenta los valores obtenidos de $\log_{10}(\text{ER})$ para la Transformada de Dirac-Fourier (TDF) de la PIAB en el estado basal utilizando distintos métodos de integración.

Cuadro 3: a_k calculados con distintos métodos de integración.

p	Trapezio	Simpson 3/8	Simpson 3/8-Filon
1	-13.4430	-12.5264	-3.9311
21	-11.2480	-11.3252	-6.7144
41	-12.8507	-13.1450	-7.1618
61	-12.4141	-12.6455	-6.3081
81	-12.4141	-13.8872	-6.6025
101	-13.1204	-13.2451	-7.3981
121	-12.8103	-12.0881	-5.2086
141	-11.7416	-15.4609	-6.6558
161	-13.4480	-13.3795	-6.5198
181	-13.0290	-13.0290	-5.8976
201	-14.5807	-14.5807	-6.9330

A partir de los resultados de la Tabla 3 se observa que dos de los métodos, Trapecio y Simpson 3/8, generan valores que siguen un patrón general similar, mientras que el método Simpson 3/8-Filon presenta diferencias significativas. En particular, este último produce valores sistemáticamente menores en magnitud que los otros dos métodos.

En el método de integración Simpson 3/8-Filon, los pesos de integración dependen inicialmente de p . Al aplicar la cuadratura para calcular las a_k , esta dependencia se transforma en una dependencia en k_{ak} . Como los pesos implican una división, al cambiar los pesos para calcular a_k con $k_{ak} = 0$ se produce una división por cero, lo que afecta la precisión y estabilidad del método. Como consecuencia, se observa una disminución en la precisión de los coeficientes a_k calculados mediante esta técnica, lo que limita su eficacia para ciertos rangos.

4.2. Análisis de ω_k

4.3. Análisis de los coeficientes ω_k

Como se mencionó anteriormente en la tesis, las ω_k fueron calculados de forma analítica para mejorar la precisión del método Clenshaw-Curtis-Filon. Estos cálculos se detallan en la subsección *Métodos utilizados*, donde se muestra la formulación exacta.

No obstante, al examinar los valores de ω_k , se observa que, para ciertos rangos del parámetro p , los coeficientes de las representaciones de las ω_k de pueden alcanzar magnitudes muy grandes. Esta característica tiene un impacto directo en la precisión numérica del método, pues valores elevados de ω_k amplifican los coeficientes de la representación, lo que a su vez incrementa la susceptibilidad a errores de redondeo y problemas de estabilidad numérica.

Este comportamiento explica, en parte, las dificultades que presenta el método Clenshaw-Curtis-Filon al manejar integrales altamente oscilatorias con parámetros elevados, y subraya la importancia de contar con estrategias que mitiguen el efecto de estas oscilaciones extremas para preservar la precisión computacional.

Los gráficos correspondientes, disponibles en la subsección *Métodos utilizados*, ilustran claramente esta dependencia y las oscilaciones de ω_k en función de p , reflejando la complejidad del problema numérico que se aborda en esta tesis.

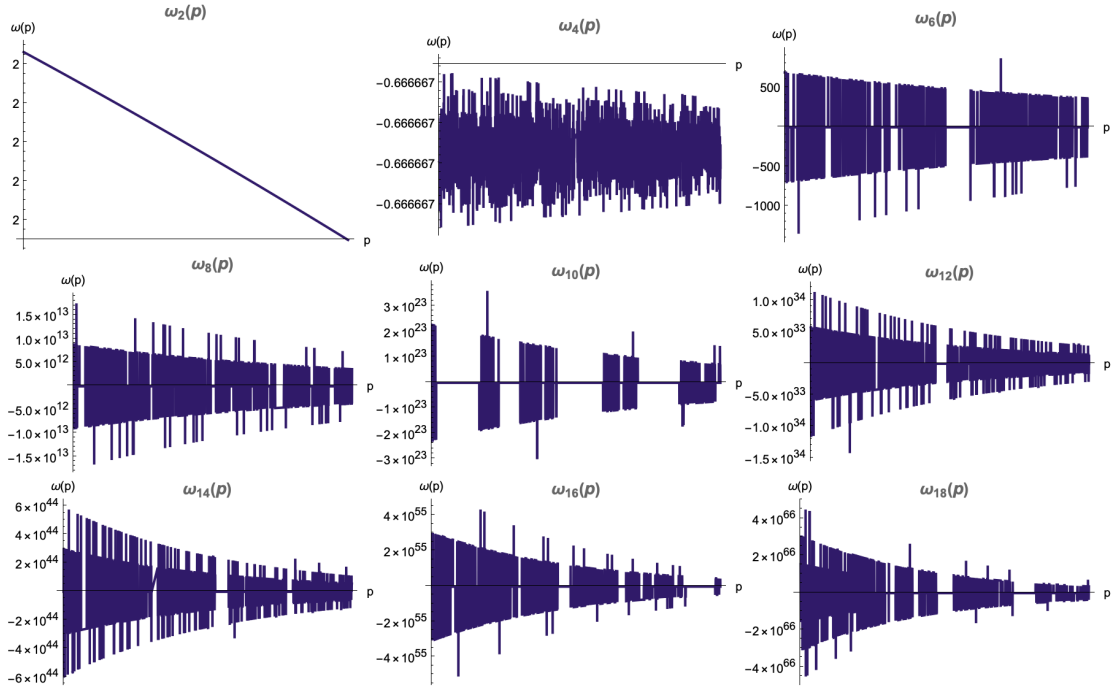


Figura 6: Función ω_k con kernel $\cos(p \cos \theta)$ variando p

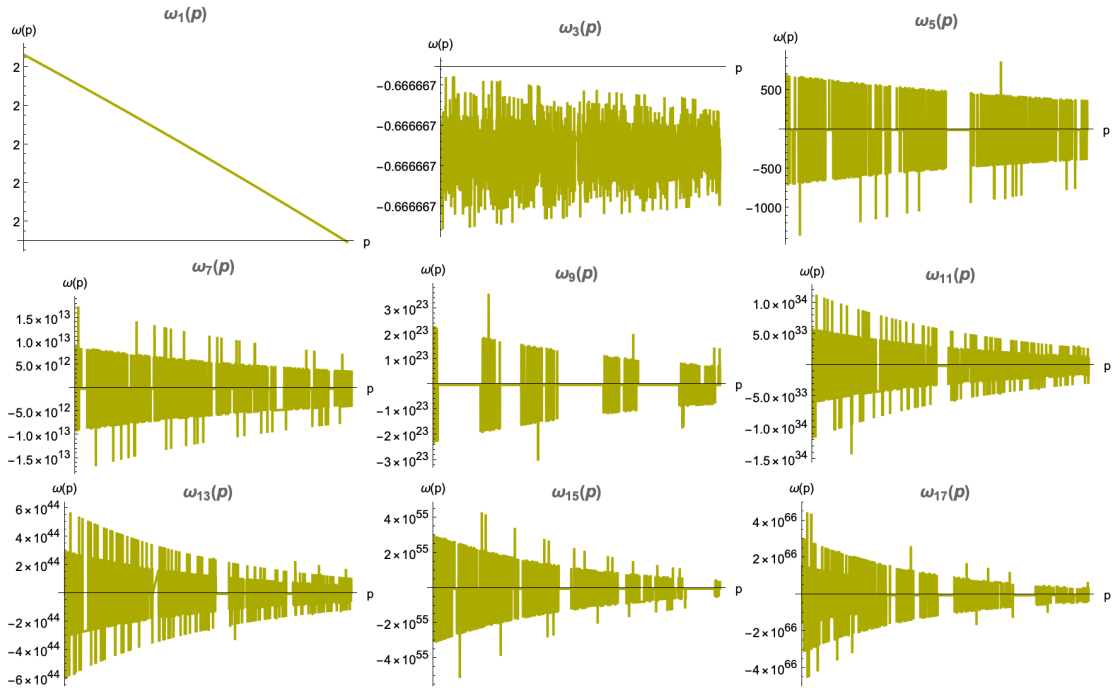


Figura 7: Función ω_k con kernel $\sin(p \cos \theta)$ variando p

En conclusión, a medida que aumentan los valores de k y del número cuántico n , la precisión en el cálculo de los coeficientes a_k disminuye significativamente. Por otro lado, los coeficientes de las ω_k cuando presentan magnitudes

muy grandes para valores elevados del parámetro p , lo que conduce a errores de redondeo numérico. Esta combinación de factores contribuye a que el método Clenshaw-Curtis-Filon no alcance la precisión adecuada en casos con alta oscilación, limitando su efectividad para estados excitados.

4.4. Evaluación del método CCF para la transformada de Dirac-Fourier mediante NIntegrate en Mathematica

En esta subsección se presentan y analizan los resultados obtenidos al calcular la transformada de Dirac-Fourier del sistema de la partícula en una caja mediante la rutina `NIntegrate` de Mathematica. La integración numérica se realizó empleando los parámetros por defecto que ofrece la función, los cuales se resumen en la Tabla [4](#).

Cuadro 4: Parámetros por defecto de `NIntegrate` en Mathematica 14.1 utilizados para el cálculo

Parámetro	Valor por defecto	Descripción
<code>WorkingPrecision</code>	<code>MachinePrecision</code>	Precisión numérica en punto flotante de doble precisión. Equivale a aproximadamente 24 dígitos decimales significativos o 80 bits de precisión binaria.
<code>AccuracyGoal</code>	Automático (generalmente 12)	Busca que el error absoluto sea menor que aproximadamente 10^{-12} , lo que garantiza alrededor de 12 dígitos decimales correctos.
<code>PrecisionGoal</code>	Automático (generalmente 12)	Controla la precisión relativa del resultado, buscando típicamente entre 12 dígitos significativos, en combinación con <code>AccuracyGoal</code> .
Método de integración	Selección automática (dinámico)	Mathematica elige el método más adecuado entre: <ul style="list-style-type: none"> • Cuadraturas Gauss-Kronrod adaptativas • Subdivisión automática del intervalo • Reglas Clenshaw-Curtis y otras cuadraturas clásicas Esta elección busca un balance entre eficiencia computacional y precisión.

Es importante mencionar que la documentación de *Mathematica* se menciona que, para calcular integrales altamente oscilatorias, el programa utiliza una versión modificada del método de Clenshaw-Curtis basada en los trabajos de Piessens y Branders. Sin embargo, el software no explica con claridad qué modificaciones hace ni cómo combina los distintos pasos internamente, por lo que sólo es posible reconocer que usa una estrategia relacionada con Clenshaw-Curtis, pero sin conocer los detalles exactos con los que lleva a cabo la integración numérica [46, 50].

Posteriormente, para evaluar la precisión de la aproximación numérica, se calculó el error relativo (ER) entre los valores obtenidos mediante `NIntegrate` y la solución analítica conocida para la transformada de Dirac-Fourier en este sistema para PIAB y HOC. En las siguientes gráficas se presentan los resultados obtenidos al aplicar el método Clenshaw-Curtis-Filon (CCF) utilizando la rutina `NIntegrate` de *Mathematica*, con los parámetros pre-determinados. Estos resultados corresponden a la evaluación numérica de la transformada de Dirac-Fourier en el sistema de la partícula en una caja.

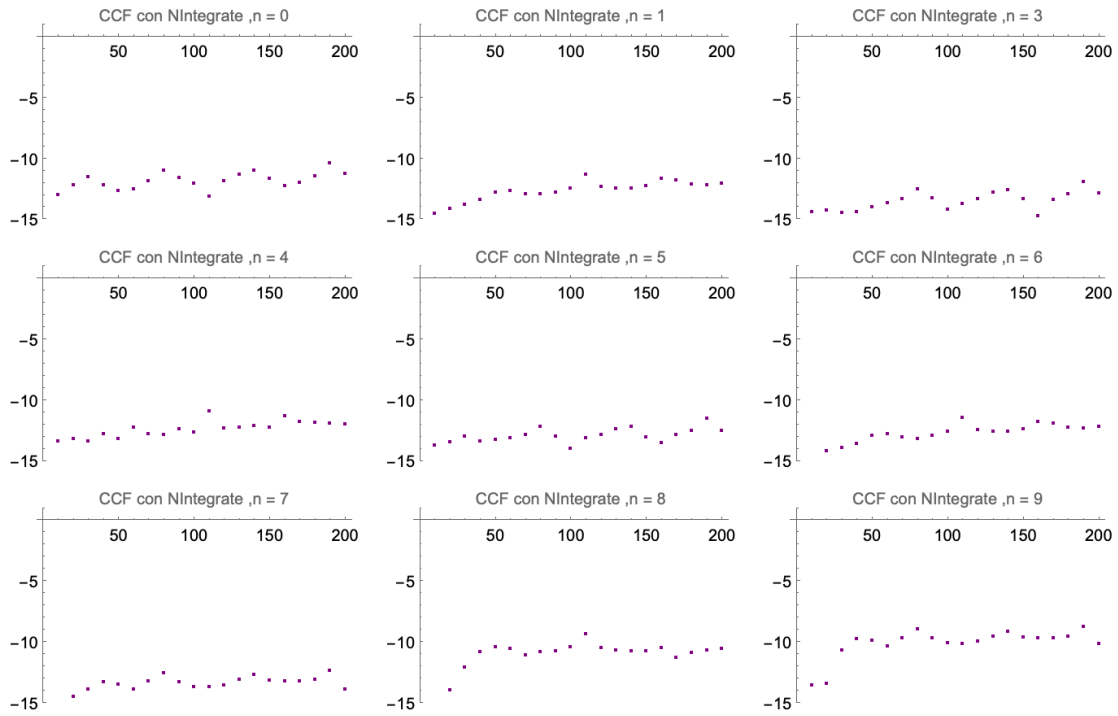


Figura 8: Resultados obtenidos al calcular la transformada de Dirac-Fourier para el sistema de la partícula en una caja, utilizando el método Clenshaw–Curtis–Filon implementado mediante la rutina `NIntegrate` de *Mathematica* con los parámetros por defecto. En la gráfica se muestra el comportamiento del logaritmo base 10 del error relativo (ER) comparado con la solución analítica, en función del número cuántico n .

En las gráficas anteriores se puede observar que el comportamiento del error relativo es excepcionalmente bueno, fluctuando entre aproximadamente 10^{-12} y 10^{-14} . Estos valores indican una precisión numérica muy alta en los cálculos realizados mediante la rutina `NIntegrate` de *Mathematica* con el método Clenshaw–Curtis–Filon aplicado a la transformada de Dirac-Fourier para el sistema de la partícula en una caja.

La estabilidad y baja magnitud del error relativo refuerzan la confiabilidad de los valores numéricos obtenidos, otorgando una gran confianza en la exactitud del método y en la implementación computacional empleada. Esta validación es fundamental porque asegura que el procedimiento numérico elegido es adecuado para manejar integrales oscilatorias complicadas con un nivel de precisión acorde a los requerimientos de la investigación.

HOC

Además, este análisis adquiere particular relevancia en el contexto de sistemas más complejos, como el oscilador armónico cuántico confinado, para los cuales no se dispone de una solución analítica explícita. En estos casos, los cálculos numéricos realizados mediante la rutina `NIntegrate` de *Mathematica* serán tomados como referencia o “solución de referencia” para evaluar la efectividad y precisión de otros métodos numéricos aplicados. Por lo tanto, la confirmación de la alta precisión obtenida en el sistema PIAB garantiza la solidez de este enfoque y respalda su aplicación en escenarios donde la validación analítica no es posible.

A continuación, se presentan los resultados obtenidos para el sistema del oscilador armónico cuántico confinado, calculados mediante la rutina `NIntegrate`, con el objetivo de establecer una base de comparación confiable frente a otros esquemas numéricos desarrollados en este trabajo.

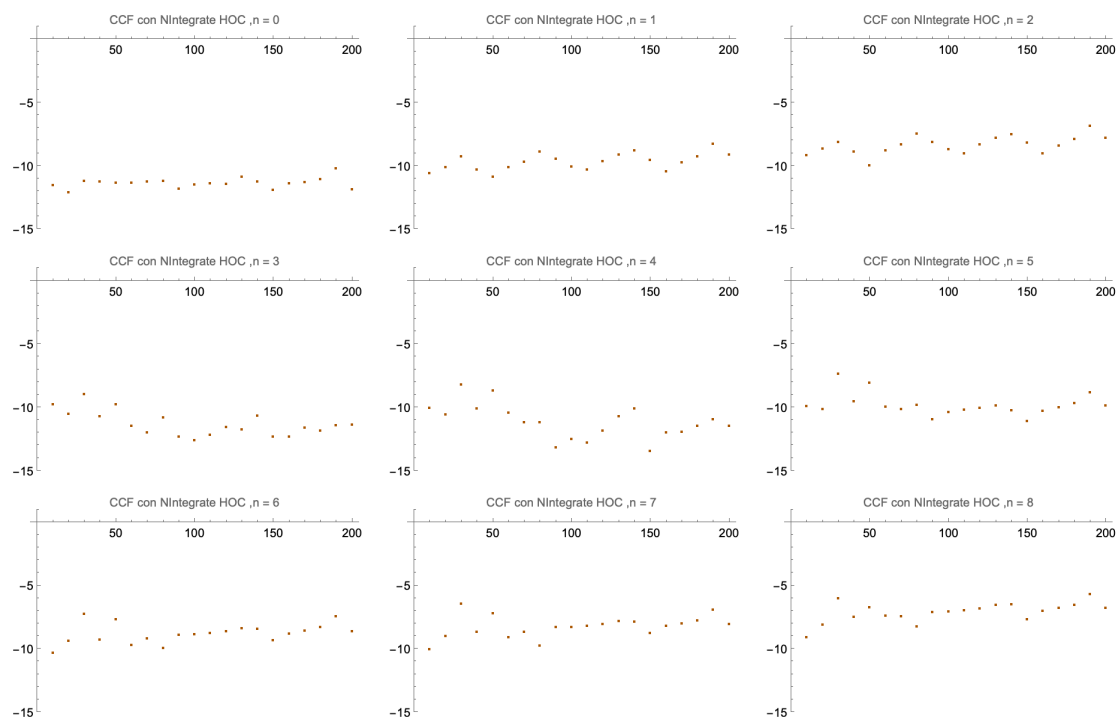


Figura 9: Resultados obtenidos al calcular la transformada de Dirac-Fourier para el sistema de la partícula en una caja, utilizando el método Clenshaw–Curtis–Filon (CCF) implementado mediante la rutina `NIntegrate` de *Mathematica* con los parámetros por defecto. En la gráfica se muestra el comportamiento del logaritmo base 10 del error relativo (ER) comparado con la solución analítica, en función del número cuántico n .

En este análisis también se observa que, conforme el número cuántico n aumenta, es decir, cuando el sistema se encuentra en estados más excitados, la precisión tiende a disminuir ligeramente. Este comportamiento puede atribuirse a la mayor oscilación de las funciones de onda en dichos estados.

5. Organización de los Códigos de Implementación

En esta sección se presenta la colección completa de códigos computacionales utilizados para la implementación de los diferentes métodos numéricos en el análisis de sistemas cuánticos unidimensionales confinados. Dado el volumen de programas y la diversidad de algoritmos aplicados, se ha optado por una organización estructurada que facilite su consulta y comprensión.

Se agrupan los códigos en función del sistema físico considerado: primero, la partícula en una caja y posteriormente el oscilador armónico confinado. Para cada sistema, los códigos se dividen en dos grandes categorías: los métodos desarrollados y aplicados en el cuerpo principal de la tesis, y los métodos implementados como complemento en el apéndice.

5.1. Sistema PIAB

- En la tesis:
 - Simpson_{3/8}-Filon:
 - ◊ Niveles pares: [Código niveles pares](#)
 - ◊ Niveles impares: [Código niveles impares](#)
 - Clenshaw-Curtis (CC):
 - ◊ Niveles pares: [Código niveles pares](#)
 - ◊ Niveles impares: [Código niveles impares](#)
 - Clenshaw-Curtis-Filon (CCF):
 - ◊ Niveles pares: [Código niveles pares](#)

◇ Niveles impares: [Código niveles impares](#)

• **En el apéndice:**

○ Simpson clásico:

◇ Niveles pares: [Código niveles pares](#)

◇ Niveles impares: [Código niveles impares](#)

○ Simpson_{3/8}:

◇ Niveles pares: <://onlinegdb.com/mO7aJBJOx0Código niveles pares>

◇ Niveles impares: [Código niveles impares](#)

○ Trapecio-Filon:

◇ Niveles pares: [Código niveles pares](#)

◇ Niveles impares: [Código niveles impares](#)

○ Simpson-Filon:

◇ Niveles pares: [Código niveles pares](#)

◇ Niveles impares: [Código niveles impares](#)

○ CCF, a_k calculado por Simpson3/8:

◇ Niveles impares: [Código niveles impares](#)

○ CCF, a_k calculado por Simpson3/8-F:

◇ Niveles impares: [Código niveles impares](#)

5.2. Sistema HOC

• **En la tesis:**

○ Simpson_{3/8}-Filon:

◇ Niveles pares: [Código niveles pares](#)

◇ Niveles impares: [Código niveles impares](#)

○ Clenshaw-Curtis (CC): [Código CC](#)

○ Clenshaw-Curtis-Filon (CCF): [Código CCF](#)

• **En el apéndice:**

- Simpson clásico: [Código Simpson clásico](#)
- Simpson_{3/8}: [Código Simpson_{3/8}](#)
- Trapecio-Filon: [Código Trapecio-Filon](#)
- Simpson-Filon: [Código Simpson-Filon](#)

Cada uno de estos códigos cuenta con variantes para estados energéticos pares e impares, que se pueden encontrar en los repositorios enlazados.



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

ACTA DE EXAMEN DE GRADO

No. 00142

Matrícula: 2223803345

Cálculo numérico de la transformada de Fourier en sistemas cuánticos confinados unidimensionales.

En la Ciudad de México, se presentaron a las 15:00 horas del día 2 del mes de diciembre del año 2025 en la Unidad Iztapalapa de la Universidad Autónoma Metropolitana, los suscritos miembros del jurado:

DR. JULIO MANUEL HERNANDEZ PEREZ
DR. NORBERTO AQUINO AQUINO
DR. HUMBERTO LAGUNA GALINDO




KAREN LETICIA TREJO GONZALEZ
ALUMNA

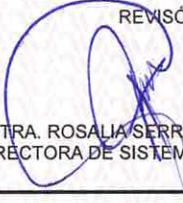
Bajo la Presidencia del primero y con carácter de Secretario el último, se reunieron para proceder al Examen de Grado cuya denominación aparece al margen, para la obtención del grado de:

MAESTRA EN CIENCIAS (QUÍMICA)

DE: KAREN LETICIA TREJO GONZALEZ

y de acuerdo con el artículo 78 fracción III del Reglamento de Estudios Superiores de la Universidad Autónoma Metropolitana, los miembros del jurado resolvieron:

APROBAR


REVISÓ
MTRA. ROSALIA SERRANO DE LA PAZ
DIRECTORA DE SISTEMAS ESCOLARES

Acto continuo, el presidente del jurado comunicó a la interesada el resultado de la evaluación y, en caso aprobatorio, le fue tomada la protesta.

DIRECTOR DE LA DIVISIÓN DE CBI


DR. ROMAN LINARES ROMERO

PRESIDENTE


DR. JULIO MANUEL HERNANDEZ PEREZ

VOCAL


DR. NORBERTO AQUINO AQUINO

SECRETARIO


DR. HUMBERTO LAGUNA GALINDO