Practica 9. La ecuación de Schrödinger en 1D: Métodos de disparo y de Numerov

Dr. Ramón Carrillo Bastos

Física Computacional

1. La ecuación de Schrödinger

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+V\left(x\right)\psi\left(x\right)=E\psi\left(x\right), \tag{1}$$

donde $\psi\left(x\right)$ es la función de onda, $V\left(x\right)$ es la energía potencial, m es la masa y $\hbar$ es la constante de Planck dividida entre 2π. Este es un problema de eigenvalor, ya que una vez que se imponen condiciones de frontera uno debe encontrar las energías (eigenvalores) para los cuales se satisface la ecuación.

Para encontrar los eigevalores, integraremos la ecuación anterior con respecto de x, para una energía E dada, comenzando con x_0 y x_1. Concretamente si inicialmente $x=x_0$ y $x_1=x_0+h$, con h es el paso de integración, tendremos que al n-ésimo paso de integración, $x=x_n=x_0+nh$. Estamos interesados en encontrar $\psi_n\equiv\psi\left(x_n\right)$ dados ψ_0 y ψ_1.

2. Método de Numerov

Reescribimos la ecuación 1 como sigue

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\left(x\right)\psi\left(x\right)=0 \tag{2}$$

y tomamos ventaja de su estructura particular: lineal en ψ y no hay término de primera derivada. Un algoritmo apropiado para este tipo de problemas es el algoritmo de Numerov, que es más simple que métodos avanzados como el Runge-Kutta de orden 4 y en principio es un orden superior.

Para deducir las ecuaciones de este método partimos de el desarrollo en seri de Taylo para ψ un paso adelante

$$\psi\left(x+h\right)=\psi\left(x\right)+h\psi'\left(x\right)+\frac{h^2}{2!}\psi^{(2)}\left(x\right)+\frac{h^3}{3!}\psi^{(3)}\left(x\right)+\frac{h^4}{4!}\psi^{(4)}\left(x\right)+..., \tag{3}$$

y un paso atrás,

$$\psi\left(x-h\right)=\psi\left(x\right)-h\psi'\left(x\right)+\frac{h^2}{2!}\psi^{(2)}\left(x\right)-\frac{h^3}{3!}\psi^{(3)}\left(x\right)+\frac{h^4}{4!}\psi^{(4)}\left(x\right)+... \tag{4}$$

sumando estas dos expresiones llegamos a

$$\psi\left(x+h\right)+\psi\left(x-h\right)=2\psi\left(x\right)+h^2\psi^{(2)}\left(x\right)+\frac{h^4}{12}\psi^{(4)}\left(x\right)+O\left(h^4\right). \tag{5}$$

Por tanto podemos escribir las segunda derivada como sigue,

$$\psi^{(2)}\left(x\right)=\frac{\psi\left(x+h\right)+\psi\left(x-h\right)-2\psi\left(x\right)}{h^2}-\frac{h^4}{12}\psi^{(4)}\left(x\right)+O\left(h^4\right). \tag{6}$$

Podemos evaluar el término que involucra la 4ta derivada. Para hacer esto, tomamos Ec. 2 y aplicamos el operador $\left[1+\left(h^2/12\right)d^2/dx^2\right]$ en ambos lados, obtenemos

$$\psi^{(2)}(x)+\frac{h^2}{12}\psi^{(4)}+k^2(x)\,\psi(x)+\frac{h^2}{12}\frac{d^2}{dx^2}\left[k^2(x)\,\psi(x)\right]=0. \tag{7}$$

Substituyendo $\psi^{(2)}(x)+\dfrac{h^2}{12}\psi^{(4)}$ de ecuación 7 en Ec. 6 llegamos a la siguiente expresión

$$-k^2(x)\,\psi(x)-\frac{h^2}{12}\frac{d^2}{dx^2}\left[k^2(x)\,\psi(x)\right]=\frac{\psi(x+h)+\psi(x-h)-2\psi(x)}{h^2}+O\left(h^4\right), \tag{8}$$

multiplicamos esta expresión por h^2 para obtener,

$$-h^2k^2(x)\,\psi(x)-\frac{h^4}{12}\frac{d^2}{dx^2}\left[k^2(x)\,\psi(x)\right]=\psi(x+h)+\psi(x-h)-2\psi(x)+O\left(h^6\right), \tag{9}$$

Evlauamos la expresión $\dfrac{d^2}{dx^2}\left[k^2(x)\,\psi(x)\right]$ de manera aproximada,

$$\frac{d^2}{dx^2}\left[k^2(x)\,\psi(x)\right]\simeq\frac{k^2(x+h)\,\psi(x+h)+k^2(x-h)\,\psi(x-h)-2k^2(x)\,\psi(x)}{h^2}, \tag{10}$$

esta es una fórmula simple de error$O\left(h^2\right)$, pero ya que está multiplicada por h^4 en la ecuación 9 preservará la precisión total de $O(h^6)$, sustituyendo Ec.10 en Ec. 9 obtenemos la expresión,

$$-h^2k^2(x)\,\psi(x)-\frac{h^4}{12}\frac{k^2(x+h)\,\psi(x+h)+k^2(x-h)\,\psi(x-h)-2k^2(x)\,\psi(x)}{h^2}=\psi(x+h)+\psi(x-h)-2\psi(x)+O\left(h^6\right), \tag{11}$$

arreglando términos llegamos a,

$$\psi(x+h)=\frac{+2\psi(x)-\psi(x-h)-h^2k^2(x)\,\psi(x)+\left(\dfrac{1}{12}h^2\right)\left[2k^2(x)\,\psi(x)-k^2(x-h)\,\psi(x-h)\right]}{\left(1+\dfrac{1}{12}h^2k^2(x+h)\right)}+O\left(h^6\right), \tag{12}$$

que es el método de Numerov aplicado a la edcuación 2.

3. El pozo de potencial y el método de disparo

Considere el pozo de potencial infnito.

1. Implemente el algoritmo de Numerov para solucionarlo para alguna E dada.
2. Ahora la ecuación diferencial debe cumplir las condiciones de frontera, de hecho la energía válída será aquella que haga cumplir las condiciones de frontera,. Recuerde que fue así como obutvo analíticamente las eigenenergías del pozo de potencial. Entonces implemente un método de bisección para encuentrar las eigenergías del pozo de potencial.

A la combinación de un método de solución de una ecuación diferencial con un método para encontrar raíces para cumplir las condiciones de frontera se le conoce como método de disparo.