

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

Hiram K. Herrera Alcantar¹

¹Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Baja California,
Apartado Postal 1880, 22800 Ensenada, Baja California, México.*

(Dated: 21 de marzo de 2018)

Se utiliza el método de Numerov para integrar la ecuación de onda de un electrón confinado en un pozo de potencial infinito de longitud L , posteriormente se usará el método de bisección para encontrar las energías que anulan la función de onda en las fronteras. Se obtienen resultados satisfactorios con un porcentaje de error muy bajo, comprobando la sencillez del método y su implementación, así como su precisión.

I. INTRODUCCIÓN

La mecánica cuántica es una rama de la física que se encarga de dar una descripción fundamental de la naturaleza a escalas muy pequeñas, por ejemplo atómicas o subatómicas.

La función de onda $\Psi(x)$ de una partícula con energía E que atraviesa un potencial $V(x)$ obedece la ecuación de Schrödinger [1]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (1)$$

Este es un problema de eigen valores y se quiere encontrar la función de onda (eigenestados), así como las energía (eigenvalores) que satisfacen la ecuación. Usualmente para la solución de esta ecuación se reescribe de la siguiente manera:

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + k(x)^2\Psi(x) = 0 \quad (2)$$

donde $k(x)^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))$

En esta práctica nos enfocaremos en solucionar numéricamente el pozo de potencial infinito de longitud L (ver Fig. 1 definido como

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 \leq x \leq L \\ \infty & \text{De otro modo} \end{cases} \quad (3)$$

El cual tiene como soluciones los eigenestados dados por

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad (4)$$

con las eigenenergías:

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2 \quad (5)$$

donde $n = 1, 2, 3, \dots$

El objetivo de esta práctica es resolver numéricamente el pozo de potencial infinito utilizando el método de disparo para encontrar las eigenenergías que satisfacen la ecuación de Schrödinger.

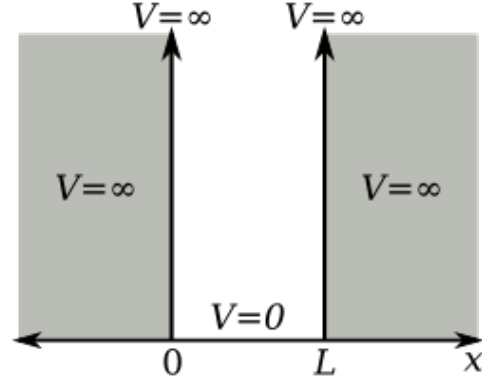


Figura 1. Pozo de potencial infinito.

II. EL MÉTODO DE NUMEROV

Este método se especializa en la solución de ecuaciones diferenciales ordinarias que no contienen primeras derivadas[2], como la ecuación de Schrödinger por ejemplo.

Para deducir las ecuaciones de este método se parte del desarrollo en series de Taylor para $\Psi(x)$

$$\Psi(x+h) = \Psi(x) + h\Psi^{(1)}(x) + \frac{h^2}{2}\Psi^{(2)}(x) + \frac{h^3}{3!}\Psi^{(3)}(x) + \frac{h^4}{4!}\Psi^{(4)}(x) + \dots$$

$$\Psi(x-h) = \Psi(x) - h\Psi^{(1)}(x) + \frac{h^2}{2}\Psi^{(2)}(x) - \frac{h^3}{3!}\Psi^{(3)}(x) + \frac{h^4}{4!}\Psi^{(4)}(x) + \dots$$

Donde $\Psi^{(n)}(x)$ representa la n-ésima derivada de $\Psi(x)$, si sumamos $\Psi(x+h)$ con $\Psi(x-h)$ obtenemos:

$$\Psi(x+h) + \Psi(x-h) \approx 2\Psi(x) + h^2\Psi^{(2)}(x) + \frac{h^4}{12}\Psi^{(4)}(x) + O(h^6)$$

Despejando la segunda derivada:

$$\Psi^{(2)}(x) \approx \frac{\Psi(x+h) + \Psi(x-h) - 2\Psi(x)}{h^2} - \frac{h^2}{12}\Psi^{(4)}(x) + O(h^4)$$

Para evaluar el término con la cuarta derivada, tomamos la ecuación (2) y aplicamos el operador $(1 + \frac{h^2}{12})\frac{d^2}{dx^2}$:

* hiram.herrera@uabc.edu.mx

$$\Psi^{(2)}(x) + \frac{h^2}{12} \Psi^{(4)}(x) + k^2(x) \Psi(x) + \frac{h^2}{12} \frac{d^2}{dx^2} [k^2(x) \Psi^{(4)}(x)] = 0$$

Sustituyendo en la expresión para $\Psi^{(2)}(x)$ obtenemos

$$-k^2(x) \Psi(x) - \frac{h^2}{12} \frac{d^2}{dx^2} [k^2(x) \Psi(x)] \approx \frac{\Psi(x+h) + \Psi(x-h) - 2\Psi(x)}{h^2} + O(h^4)$$

El término $\frac{d^2}{dx^2} [k^2(x) \Psi(x)]$ es de manera aproximada:

$$\frac{d^2}{dx^2} [k^2(x) \Psi(x)] \approx \frac{1}{h^2} [k^2(x+h) \Psi(x+h) + k^2(x-h) \Psi(x-h) - 2k^2(x) \Psi(x)]$$

Con lo que obtenemos

$$\Psi(x+h) \approx \frac{2\Psi(x) - \Psi(x-h) - h^2 k^2(x) \Psi(x)}{1 + \frac{1}{12} h^2 k^2(x+h)} + \frac{\frac{1}{12} h^2 [2k^2(x) \Psi(x) - k^2(x-h) \Psi(x-h)]}{1 + \frac{1}{12} h^2 k^2(x+h)} \quad (6)$$

III. SOLUCIÓN NUMÉRICA A POZO DE POTENCIAL INFINITO

Consideramos un pozo de potencial infinito dado por la función de la ecuación (3) y un electrón confinado a este potencial. Fijamos las primeras dos posición como $x_0 = 0$ y $x_1 = h$ donde h es el ancho del paso de posición en esta práctica se ha usado $h = 0.001$, ahora fijamos $f(x_0) = 0$ y $f(x_1) = h$, como primera aproximación lineal, esto para iniciar el método de Numerov para solucionar la ecuación.

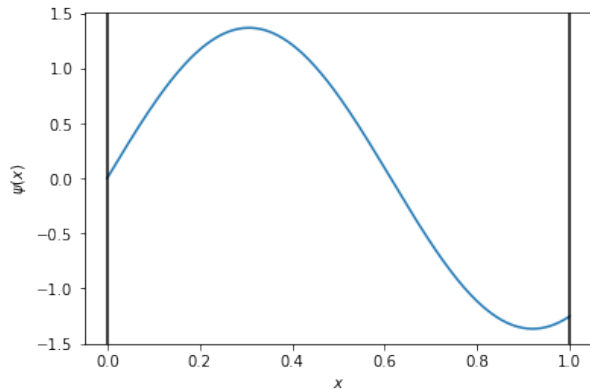


Figura 2. Función de onda $\Psi(x)$ con $E = 1$ eV.

Con estas condiciones iniciales y utilizando una energía de $E = 1$ eV, obteniendo la función de onda que se muestra en la Figura 2.

Como se puede observar para la energía $E = 1$ eV no hace que la función de onda en la frontera $x = L$ sea cero, para encontrar las energías que cumplen esta condición hacemos uso del método de bisección[3] evaluando la función de onda con diferentes Energías en un intervalo (E_{min}, E_{max}) , iterando hasta encontrar una energía E_n donde $\Psi(L) = 0$, es decir, que satisface la condición de frontera.

Para fijar los intervalos en los que se buscan estos eigenvalores hacemos uso de los valores teóricos dados por la ecuación (5). Se buscaron las primeras cinco eigenenergías obteniendo los resultados que se muestran en la Tabla I.

Tabla I. Eigenenergías obtenidas numéricamente con el método de disparo en comparación de las eigenenergías teóricas dadas por la ecuación (5), así como el error porcentual de estos valores.

E_{num} (eV)	E_{teo} (eV)	Error %
0.37602794	0.37602790	9.978213E-06
1.50411159	1.50411162	1.910129E-06
3.38425118	3.38425114	1.172034E-06
6.01644641	6.01644647	9.194335E-07
9.40069765	9.40069760	4.675397E-07

En la Figura 3 se muestra la función de onda normalizada que se obtuvo numéricamente comparada con el valor teórico dado por la ecuación (4) para $n = 1$.

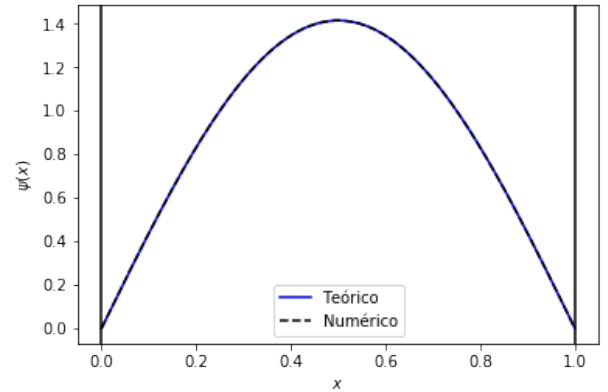


Figura 3. Función de onda normalizada obtenida numéricamente para $E = 0.376027$ en comparación con la función de onda teórica.

Podemos observar que el valor numérico coincide bastante con el valor teórico esperado, tanto en la función de onda como en la eigenenergía con un error global del 9.978213E-06 %.

Posteriormente se graficaron las funciones de onda normalizadas obtenidas de forma numérica para las primeras cinco eigenenergías encontradas, obteniendo como resultado la Figura 4.

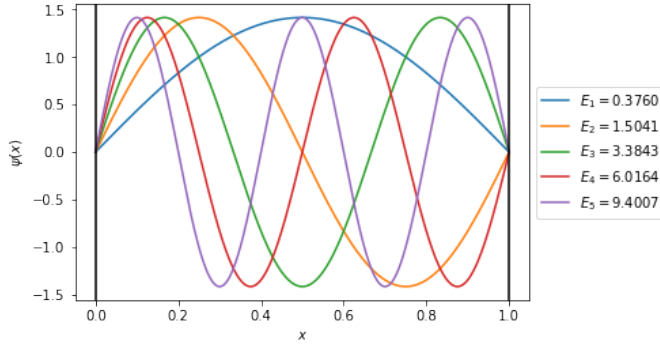


Figura 4. Primeras cinco funciones de onda obtenidas para los valores de las energías numéricas reportadas en la Tabla I.

IV. CONCLUSIONES

Por la magnitud de los errores obtenidos en las energías del pozo de potencial infinito, podemos concluir que el método del disparo, que incluye el método de Numerov y de bisección, es efectivo para la solución de este tipo de problemas.

Ya que es sencillo de implementar y el error es pequeño a pesar de la sencillez del método, además de que funciona para ecuaciones diferenciales donde no aparece la primera derivada de la función, esto se puede implementar en muchos problemas físicos, por ejemplo un oscilador armónico, o en cualquier ecuación de movimiento que no involucre la velocidad.

-
- [1] Ramamurti Shankar. *Principles of quantum mechanics*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [2] Rubin H Landau, Cristian C Bordeianu, et al. *Compu-*

- tational Physics: Problem Solving with Python*. John Wiley & Sons, 2015.
- [3] Richard L Burden and J Douglas Faires. *Análisis numérico*. Thomson Learning, 2002.