Practica 10. El pozo de potencial finito

Dr. Ramón Carrillo Bastos

Física Computacional

1. La ecuación de Schrödinger

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es

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

donde $\psi(x)$ es la función de onda, $V(x)$ 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 $\psi_n \equiv \psi(x_n)$ dados ψ_0 y ψ_1.

Consideramos un potencial de la forma

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 = 83\,\mathrm{MeV} & |x| \leq a = 2\ \mathrm{fm} \\ 0 & |x| > a = 2\ \mathrm{fm} \end{cases}$$

Tomamos $\frac{2m}{\hbar^2} \approx 0.0483\,\frac{1}{\mathrm{MeVfm}^2}$. Usando el método de Numerov,

$$\psi_{n+1} = \frac{+2\psi_n - \psi_{n-1} - h^2k_n^2\psi_n + \left(\frac{1}{12}h^2\right)\left[2k_n^2\psi_n - k_{n-1}^2\psi_{n-1}\right]}{\left(1 + \frac{1}{12}h^2k_{(n+1)}^2\right)} + O\left(h^6\right), \tag{2}$$

encuentre las eigenergías de este problema así como las eigenfunciones.

2. El pozo de potencial finito y el método de disparo

1. Para solucionar este problemas primero consideramos las soluciones asintóticas. Tomamos una región de integración que sobrepasa la región del pozo, $\{-X_{max}, X_{max}\}$. Así ya que se está fuera del pozo, podemos tomar

$$\psi_{izq}(x = -X_{max}) = e^{\kappa x} = e^{-\kappa X_{max}}, \tag{3}$$

$$\psi_{der}(x = X_{max}) = e^{-\kappa x} = e^{-\kappa X_{max}}. \tag{4}$$

2. Se toman dos soluciones, una que parte por la derecha y otra por la izquierda. Pedimos que ambas coincidan en un punto x_{match}, usualmente se pide que tanto la derivada como la función sean continuas debido a la conservación de la corriente. Para hacer ambas corresponder requerimos que la razón

$$\frac{\psi'(x)}{\psi(x)}$$

, llamada derivada logarítmica sea continua, ya que encapsula a la función y a la derivada.

3. Buscamos energías en el rango $E > -V_0$. Para eso pedimos que la cantidad

$$\Delta(E,x) = \frac{\psi'_{izq}(x)/\psi_{izq}(x) - \psi'_{der}(x)/\psi_{der}(x)}{\psi'_{izq}(x)/\psi_{izq}(x) + \psi'_{der}(x)/\psi_{der}(x)}.$$

se anule en $x = x_{match}$. Se recomienda tomar x_{mathc} como la forntera derecha del pozo.