

FÍSICA E INSTRUMENTACIÓN ESPACIAL

CÁLCULO NUMÉRICO

Resolución Numérica de la Ecuación de Schrödinger



ABRIL 2024

Autores:

Víctor Ávila Camargo

José Ignacio Miguel Rodríguez

Javier Zaragozano Calvo

Índice

1. Introducción	2
1.1. Deducción de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo . .	2
1.2. Interpretación de la ecuación de Schrödinger y sus soluciones	3
2. Métodos de derivación numérica	4
2.1. Método de las diferencias finitas	4
2.1.1. Diferencial de primer orden	5
2.1.2. Diferencial de segundo orden	7
2.1.3. Error de aproximación en el método de las diferencias finitas .	8
2.2. Aproximación de la ecuación de Schrödinger	8
3. Métodos de integración numérica	10
3.1. Regla de los trapecios	10
3.1.1. Error de aproximación en la regla de trapecios	12
3.2. Regla de Simpson	13
3.2.1. Regla de Simpson compuesta	14
3.2.2. Error de aproximación en la regla de Simpson	15
4. Soluciones de la Ecuación de Schrödinger	16
4.1. Pozo de potencial infinito	16
4.1.1. Soluciones analíticas	16
4.1.2. Soluciones numéricas	17
4.2. Oscilador armónico cuántico	23
4.3. Pozo de potencial finito	27
4.3.1. Soluciones analíticas	27
4.3.2. Construcción del pozo de potencial	28
4.3.3. Soluciones numéricas	29
5. Estudio de errores para las soluciones obtenidas	33
5.1. Pozo de potencial infinito	34
5.1.1. Error en las energías	34
5.1.2. Error en las funciones	35
5.2. Oscilador armónico cuántico	35
5.2.1. Error en las energías	35
5.2.2. Error en las funciones	37
5.3. Métodos de integración	38
6. Consideraciones: Ecuación dependiente del tiempo	40
7. Anexo	41
7.1. Códigos de MATLAB	41

1. Introducción

La ecuación de Schrödinger es una de las ecuaciones más famosas e importantes de la Física Cuántica. La ecuación de Schrödinger de 1 dimensión en su forma más general es:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \hat{H} \Psi(x, t) \quad (1)$$

Donde \hat{H} es el Hamiltoniano del sistema.

Esta ecuación tiene numerosas variantes. En este artículo, nos centraremos en resolver una de sus variantes, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo que, como su propio nombre indica, el tiempo no aparece como variable independiente. Esta ecuación se puede obtener a partir de la ecuación descrita arriba, veámoslo.

1.1. Deducción de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

Sea el Hamiltoniano de un sistema cualquiera: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t)$. Si consideramos que es independiente del tiempo, $V(x, t)$ tiene que ser también independiente del tiempo ya que es el único término del Hamiltoniano con dependencia temporal. Con lo cual $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$

Nuestro objetivo es dejar un lado de la ecuación en función de t y el otro en función de x . Al ser una ecuación diferencial, vamos a usar el método de separación de variables. Entonces: $\Psi(x, t) = g(t)\psi(x)$. Y nuestra ecuación queda:

$$i\hbar \psi(x) \frac{d}{dt} g(t) = g(t) \hat{H} \psi(x) \quad (2)$$

Como el Hamiltoniano es independiente del tiempo podemos mover libremente $g(t)$ porque no va a operar sobre él. Multiplicando ambos lados por $\frac{1}{g(t)\psi(x)}$ obtenemos:

$$i\hbar g(t) \frac{d}{dt} g(t) = \psi(x) \hat{H} \psi(x) \quad (3)$$

Como cada lado depende de una variable distinta, la igualdad se cumplirá sí y solo sí el resultado es igual a una constante la cual llamaremos E . Entonces por un lado tenemos:

$$\frac{d}{dt} g(t) = -\frac{i}{\hbar} E g(t) \quad (4)$$

Lo que nos da como solución: $g(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$

Por otro lado tenemos:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x) = E \psi(x) \quad (5)$$

Esta es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y es la que nos centraremos en resolver en este artículo. La ecuación se puede abreviar del siguiente

modo: $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$ y vemos que es una ecuación de autovalores donde E se corresponde con el autovalor de \hat{H} .

Sin embargo, resolver esta ecuación no es nada fácil y, por ello, será necesario emplear métodos numéricos, los cuales serán descritos en detalle en las secciones posteriores, para encontrar una solución aproximada.

Una inquietud que le puede surgir al lector es qué interpretación tiene las soluciones que se obtengan. Así que vamos a intentar esclarecer esta duda en el siguiente apartado

1.2. Interpretación de la ecuación de Schrödinger y sus soluciones

Las soluciones que obtenemos son funciones de onda que van asociadas a la partícula que queramos describir. Esto es debido a la dualidad onda-partícula que caracteriza a todas las partículas del Universo. Sin embargo, no podemos ver estas funciones de onda del modo clásico, tenemos que verlas como funciones de probabilidad que nos indican en qué zonas es más probable que se encuentre la partícula. Esta función de probabilidad se puede describir como: $dP(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 dV$. Esto es la probabilidad de encontrar una partícula en un fragmento de volumen infinitesimal. Al ser una función de probabilidad cumple que: $\int_{\text{espacio}} |\Psi(x, t)|^2 d^3x = 1$.

Por otro lado, también encontramos valores de E asociados a la función y al Hamiltoniano. Para ver lo que significan las E que obtenemos, vamos a calcular el valor esperado de \hat{H} :

$$\begin{aligned}\langle \hat{H} \rangle_{\Psi(x, t)} &= \int \Psi(x, t)^* \hat{H} \Psi(x, t) dx = \\ &= \int \Psi(x, t)^* E \Psi(x, t) dx = E\end{aligned}\tag{6}$$

Por definición del valor esperado de \hat{H} , sabemos que representa la energía total del sistema. Es decir, los autovalores que obtengamos al resolver la ecuación nos darán un valor para la energía del sistema.

Una vez hechas todas estas aclaraciones introductorias, ya podemos comenzar con la descripción de todos los métodos numéricos y también podemos ver las soluciones obtenidas.

2. Métodos de derivación numérica

2.1. Método de las diferencias finitas

El método de diferencias finitas (FDM) es un método de aproximación para resolver ecuaciones diferenciales, su principio fundamental es transformar una ecuación diferencial en un sistema de ecuaciones algebraicas que podamos resolver. El principio del método de diferencias finitas fue desarrollado por primera vez por el excelentísimo matemático L. Euler (1707-1783), quien en 1768 dio un formato diferencial para problemas unidimensionales. En 1908, C. Runger (1856-1927) extendió el método de la diferencia a problemas bidimensionales. Sin embargo, en aquellos días, convertir la solución de ecuaciones diferenciales en la solución de un gran número de ecuaciones algebraicas era sin duda transformar un problema en otro, por lo que no se usaba ampliamente. Con el desarrollo de la tecnología informática, es posible resolver de forma rápida y precisa enormes ecuaciones algebraicas, por lo que poco a poco se ha ido utilizando ampliamente.

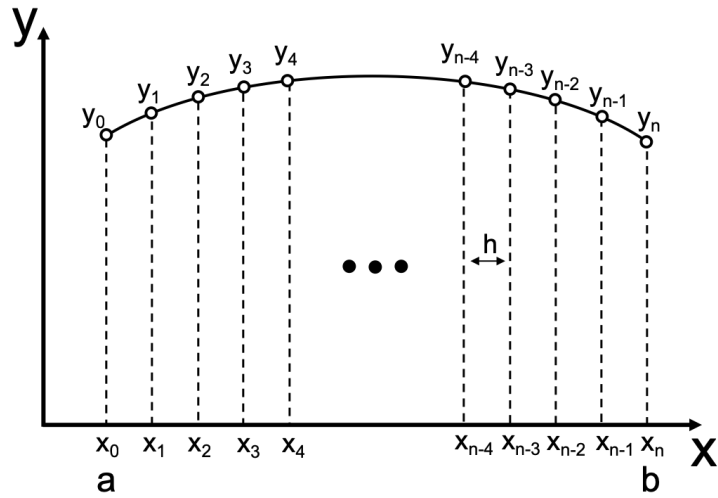
Este método nos será de gran utilidad ya que si queremos resolver la ecuación de Schrödinger

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi = E\psi \quad (7)$$

Nada más y nada menos que en el primer término ya nos encontramos una derivada segunda, lo que convierte nuestro problema en resolver una ecuación diferencial. Nuestro objetivo será aproximar esta derivada segunda por el método propuesto para que seamos capaces de computar nuestra ecuación obtener soluciones, más tarde estudiaremos el impacto de realizar esta aproximación y error que conlleva aplicarla.

El método de diferencias finitas consiste en discretizar el espacio en el que estamos trabajando y así transformar la distancia infinitesimal entre puntos de las derivadas en una distancia h . Por tanto dividimos un intervalo $[a, b]$ donde la función sea continua N veces, el espacio entre los puntos que nos queden lo llamaremos distancia de paso (h) y el tamaño de este nos dará la precisión de nuestra aproximación como veremos más adelante.

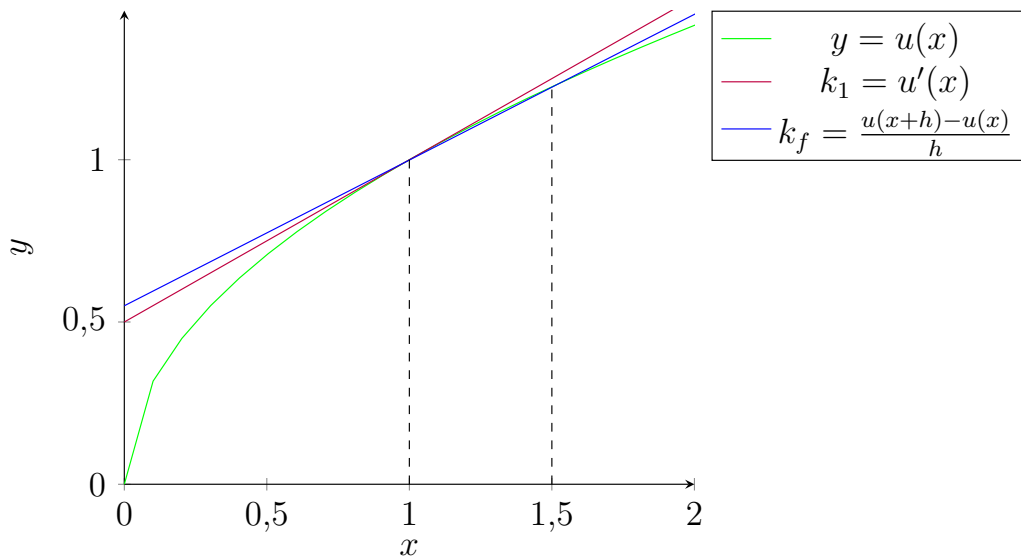
Este concepto puede hacerse más sencillo de comprender al ver la siguiente figura:



2.1.1. Diferencial de primer orden

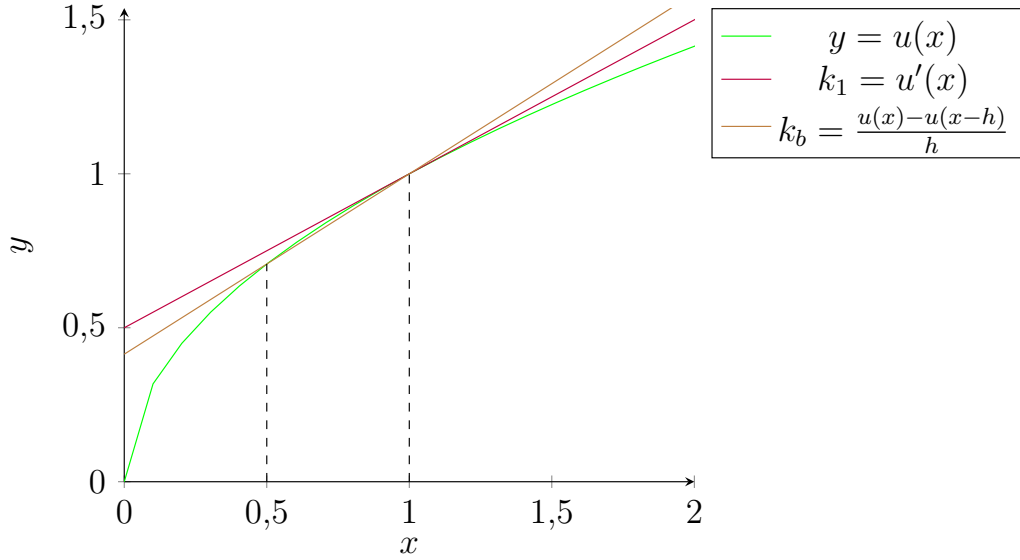
Para obtener una aproximación de la diferenciación en este nuevo espacio lo que nos viene a la mente es la definición de derivada, que la aproximaremos de la siguiente manera:

$$u'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{u(x+h) - u(x)}{h} \approx \frac{u(x+h) - u(x)}{h} \quad (8)$$



La recta roja corresponde a la derivada de la función \sqrt{x} en el punto $x = 1$, mientras que la recta azul corresponde a la de nuestra aproximación con paso $h = 1$. Como se puede observar es realmente parecido y según hagamos el paso más pequeño esta diferencia se hará menor.

Se nos puede ocurrir otra aproximación de la derivada, en vez de aproximarla con el punto siguiente podríamos tratar de aproximarla con el punto anterior.



Por lo tanto, aquí primero necesitamos discretizar el dominio de la solución y luego obtener la aproximación diferencial en cada punto discreto por separado. Para el problema unidimensional divide el intervalo de la solución en partes iguales.

La forma discreta de la ecuación (8) se expresa como:

$$u'_i(x) = \frac{1}{h}(u_{i+1} - u_i) \quad (9)$$

y la misma, pero utilizando el punto anterior y no el siguiente:

$$u'_i(x) = \frac{1}{h}(u_i - u_{i-1}) \quad (10)$$

Demostraremos ahora de donde salen estas fórmulas que tan hábilmente se nos han ocurrido.

Para la derivada de primer orden si aproximamos por Taylor:

$$u(x+h) = u(x) + hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(x) + \frac{h^3}{6}u^{(3)}(x+\xi)$$

donde $\xi \in (0, h)$. La fórmula de la diferencia directa para el diferencial de primer orden se puede obtener deformando la ecuación anterior:

$$u'_F(x) = \frac{u(x+h) - u(x)}{h} - \frac{h^2}{2}u''(x+\xi) \quad (11)$$

Ahora si aproximamos por Taylor $u(x-h)$:

$$u(x-h) = u(x) - hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(x) - \frac{h^3}{6}u^{(3)}(x+\xi)$$

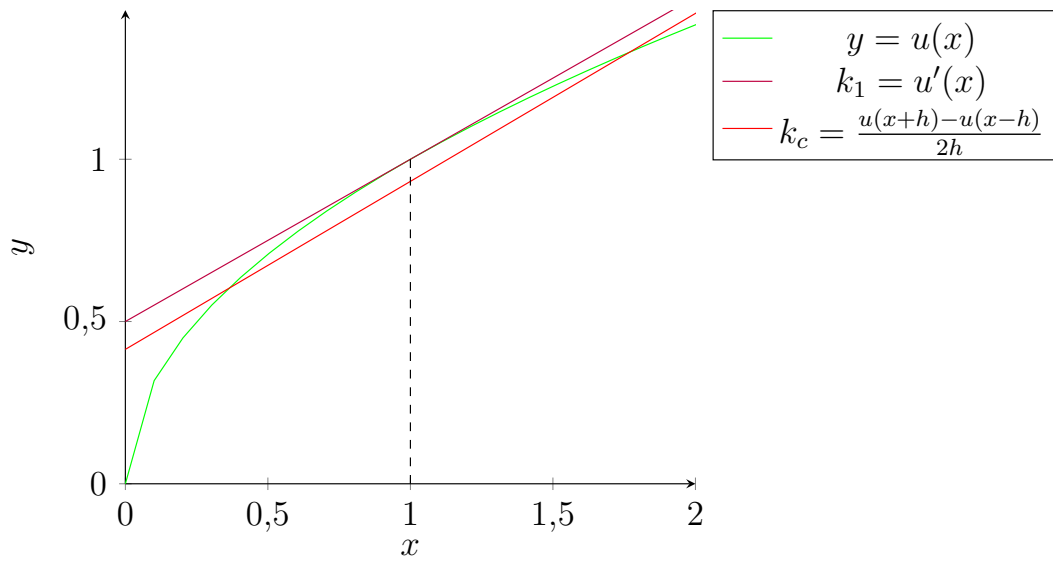
donde $\xi \in (0, h)$, si deformamos la ecuación de forma similar al caso anterior obtenemos:

$$u'_B(x) = \frac{u(x) - u(x-h)}{h} + \frac{h^2}{2}u''(x+\xi) \quad (12)$$

Si juntamos ambas ecuaciones obtenemos la fórmula de la diferencia central para el diferencial de primer orden

$$u'_C(x) = \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6}u^{(3)}(x+\xi) \quad (13)$$

Dado que el error aquí es relativo al tamaño del paso, se puede ver que las fórmulas de la diferencia hacia adelante y hacia atrás tienen una precisión de aproximación de primer orden $O(h)$, mientras que la diferencia central tiene una precisión de aproximación de segundo orden $O(h^2)$, es por esto que nos interesa juntar ambas ecuaciones (cuanto mayor sea el orden, antes tiende el error a cero). Para el caso anterior obtendríamos la siguiente aproximación:



Vemos como la pendiente de las rectas es mucho más similar que en los casos anteriores, por tanto, es coherente con nuestra demostración sobre la precisión de esta nueva aproximación de la derivada.

2.1.2. Diferencial de segundo orden

Para nuestra ecuación, sin embargo, no necesitamos obtener una aproximación de la derivada de primer orden si no de la de segundo orden. Por tanto, trabajaremos ahora con la demostración de esta.

Como anteriormente realizamos la expansión de Taylor:

$$u(x+h) = u(x) + hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(x) + \frac{h^3}{6}u^{(3)}(x) + \frac{h^4}{12}u^{(4)}(x+\xi)$$

Pasando el término $u''(x)$ a la derecha obtenemos:

$$u''_F(x) = -\frac{2u(x)}{h^2} - \frac{2u'(x)}{h} - \frac{h}{3}u^{(3)}(x) - \frac{h^2}{6}u^{(4)}(x+\xi)h^2 + \frac{2u(x+h)}{h^2} \quad (14)$$

De igual manera obtenemos:

$$u(x-h) = u(x) - hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(x) - \frac{h^3}{6}u^{(3)}(x) + \frac{h^4}{12}u^{(4)}(x+\xi)$$

$$u_B''(x) = -\frac{2u(x)}{h^2} + \frac{2u'(x)}{h} + \frac{h}{3}u^{(3)}(x) - \frac{h^2}{6}u^{(4)}(x+\xi)h^2 + \frac{2u(x-h)}{h^2} \quad (15)$$

Juntando ambas obtenemos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(-\frac{2u(x)}{h^2} - \cancel{\frac{2u'(x)}{h}} - \cancel{\frac{h}{3}u^{(3)}(x)} - \frac{h^2}{6}u^{(4)}(x+\xi)h^2 + \frac{2u(x+h)}{h^2} - \frac{2u(x)}{h^2} + \\ + \cancel{\frac{2u'(x)}{h}} + \cancel{\frac{h}{3}u^{(3)}(x)} - \frac{h^2}{6}u^{(4)}(x+\xi)h^2 + \frac{2u(x-h)}{h^2}) \rightarrow \\ \rightarrow u_C''(x) = \frac{u(x+h) - 2u(x) + u(x-h)}{2h^2} - \frac{h^2}{6}u^{(4)}(x+\xi) \end{aligned} \quad (16)$$

Donde volvemos a apreciar que tenemos una precisión de aproximación de segundo orden relativa al tamaño del paso.

2.1.3. Error de aproximación en el método de las diferencias finitas

Si recopilamos los errores de este método de derivación numérica obtenemos:

-Derivada de primer orden: diferencia ordinaria: $E \leq \frac{M_2}{2}h \sim O(h)$

donde $M_2 = \max_{x \in [x_0, x_0+h]} |f''(x)|$

-Derivada de primer orden: diferencia central: $E \leq \frac{M_3}{6}h^2 \sim O(h^2)$

donde $M_3 = \max_{x \in [x_0-h, x_0+h]} |f'''(x)|$

-Derivada de segundo orden: diferencia ordinaria: $E \leq \frac{M_4}{12}h^2 \sim O(h^2)$

donde $M_4 = \max_{x \in [x_0-h, x_0+h]} |f^{(4)}(x)|$

2.2. Aproximación de la ecuación de Schrödinger

Si ahora aplicamos esto a nuestra ecuación de Schrödinger:

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

Podemos sustituir la derivada segunda por nuestra aproximación, quedando de la siguiente manera:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_{i+1}(x) - \psi_i(x) + \psi_{i-1}(x)}{h^2} + V_i(x)\psi_i = E\psi_i(x) \quad (17)$$

Ahora debemos determinar un intervalo $[a, b]$ que será la región donde resolveremos la ecuación. Esta región la dividiremos en N subintervalos, resultando en N+1 puntos y siendo h la distancia entre estos.

El valor de la función en x_0 y en x_n será 0, ya que la partícula estará confinada en dicho intervalo. Esto será lo que nos dará nuestras condiciones de frontera. Así pues, tendremos que resolver la función en los N-1 puntos restantes.

Nuestra matriz de energía cinética será:

$$T = \frac{-\hbar^2}{2m} \begin{pmatrix} \frac{-2}{h^2} & \frac{1}{h^2} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \frac{1}{h^2} & \frac{-2}{h^2} & \frac{1}{h^2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{h^2} & \frac{-2}{h^2} & \frac{1}{h^2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{h^2} & \frac{-2}{h^2} & \frac{1}{h^2} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{h^2} & \frac{-2}{h^2} \end{pmatrix} \quad (18)$$

Mientras que la de energía potencial será:

$$V = \begin{pmatrix} V_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & V_2 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & V_3 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & V_{n-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & V_n \end{pmatrix} \quad (19)$$

Construimos nuestra matriz Hamiltoniana de la siguiente forma:

$$H = T + V \quad (20)$$

Haciendo esto obtenemos el siguiente sistema lineal:

$$\begin{aligned} \frac{-\hbar^2}{2m} \begin{pmatrix} \frac{-2}{h^2} & \frac{1}{h^2} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \frac{1}{h^2} & \frac{-2}{h^2} & \frac{1}{h^2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{h^2} & \frac{-2}{h^2} & \frac{1}{h^2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{h^2} & \frac{-2}{h^2} & \frac{1}{h^2} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{h^2} & \frac{-2}{h^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{n-1} \\ \psi_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & V_2 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & V_3 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & V_{n-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & V_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{n-1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = \\ = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{n-1} \\ \psi_n \end{pmatrix} \quad (21) \end{aligned}$$

Por lo tanto nuestras funciones serán las autofunciones de H y las energías serán los autovalores asociados a estas autofunciones. No debemos olvidar que estas funciones que obtenemos no tienen porque estar normalizadas.

Para que estas funciones tengan un significado físico, debe cumplirse que $\int_a^b |\psi(x)|^2 dx = 1$, ya que de otra forma la probabilidad de encontrar la partícula en nuestro intervalo no sería del 100 % lo cual es imposible ya que la partícula existe y por tanto debe estar dentro de él.

3. Métodos de integración numérica

La integración numérica consiste en obtener una solución aproximada a la integral:

$$\int_a^b f(x) dx \quad (22)$$

Donde la función $f(x)$ es una función de la que no conocemos su primitiva. El problema también se puede ver enunciado como un problema del valor inicial para una ecuación diferencial ordinaria con las siguientes condiciones iniciales:

$$y'(x) = f(x) \quad ; \quad y(a) = 0$$

Es decir, encontrar $y(b)$ equivale a hallar el valor de la integral.

Sin embargo, en este artículo no nos vamos a centrar en este enfoque, si no que vamos a centrarnos en métodos para aproximar la primera integral descrita. En concreto, vamos a centrarnos en las reglas de los **trapecios** y la regla **Simpson**.

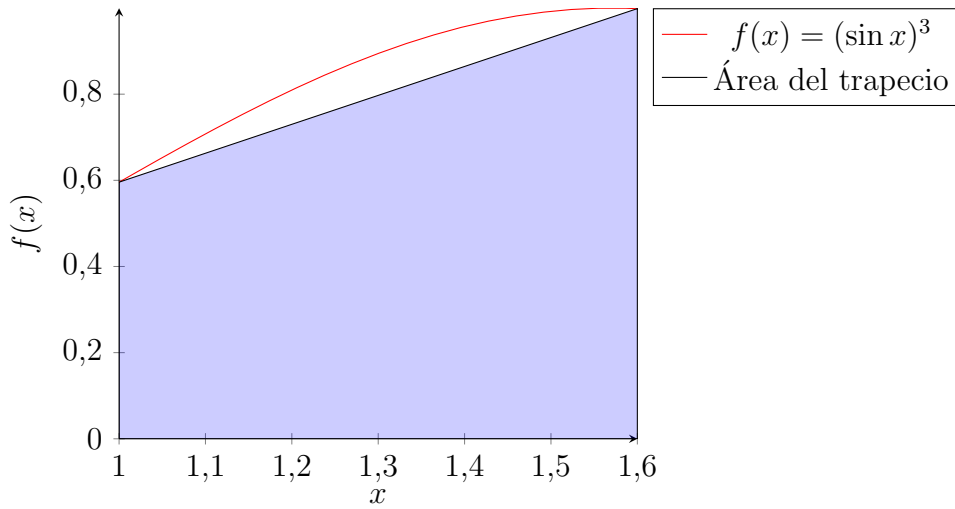
Todos estos métodos de integración están basados en funciones de interpolación. Con lo cual, conviene describir qué es un método de integración basado en funciones de interpolación.

Métodos basados en funciones de interpolación

Esta familia de métodos se basa en aproximar la función dada $f(x)$ por otra función $g(x)$ la cual conocemos el valor de su integral. Para construir esta función, se la hace pasar por un cierto número de puntos en los que f y g tienen el mismo valor. Usualmente intentamos que $g(x)$ sea un polinomio para simplificar el cálculo de su primitiva.

3.1. Regla de los trapecios

El método de los trapecios es una forma de aproximar la integral de manera numérica. Este, en su forma más básica, conecta los extremos $(a, f(a))$ y $(b, f(b))$ por una línea recta y aproxima el área por el área de un trapecio. Este método es conceptualmente sencillo y existen tablas datadas de antes del 50 A.C. que muestran como los babilonios utilizaban este método para calcular la eclíptica de Júpiter. [?]



El área de un trapecio será el área del rectángulo más el área del triángulo de encima:

$$A_{\text{trapecio}} = \underbrace{(b-a)f(a)}_{\text{área triángulo}} + \underbrace{\frac{(a-b)(f(b)-f(a))}{2}}_{\text{área trapecio}} = (a-b) \frac{f(a)+f(b)}{2} \quad (23)$$

$$A_{\text{función}} \approx (b-a) \frac{f(a)+f(b)}{2} \quad (24)$$

Esto según se ve en la figura anterior puede parecer algo poco preciso, es por esto que aumentando el número de trapecios, obtenemos una mayor precisión. Llegamos así a la regla de los trapecios compuesta, la cual se usa de la siguiente manera:

Dividimos $[a, b]$ en n subintervalos definidos por $n+1$ puntos

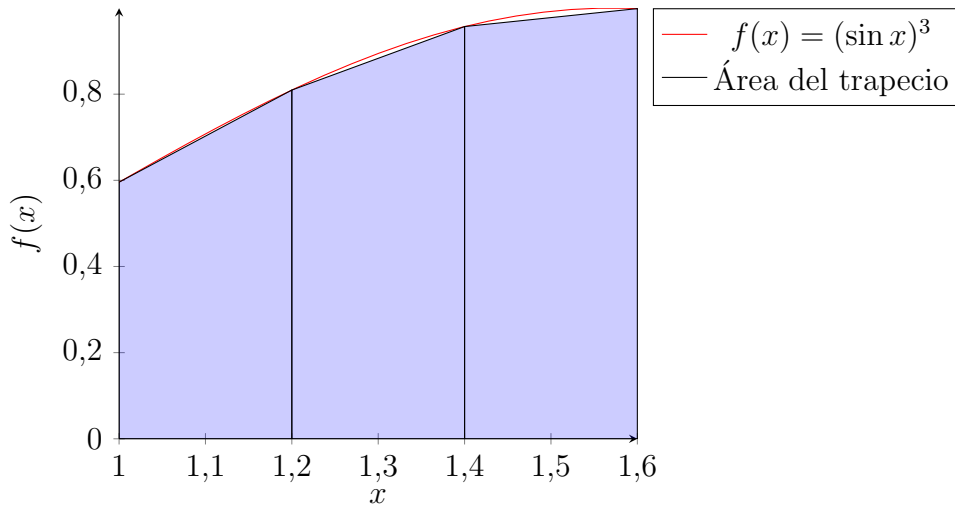
$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b, \quad \Delta x_j = x_j - x_{j-1}$$

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{j=1}^n \text{Area}(T_j) = \sum_{j=1}^n \frac{f(x_{j-1}) + f(x_j)}{2} \Delta x_j$$

Si la anchura de los trapecios es igual, $\Delta x_j = \Delta x = \frac{b-a}{n}$, entonces:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{\Delta x}{2} \left[f(a) + 2 \sum_{j=1}^{n-1} f(x_j) + f(b) \right]$$

$$\Delta x \left[\frac{f(a) + f(b)}{2} + \sum_{j=1}^{n-1} f(x_j) \right] = T_n$$



Como podemos observar de esta manera nuestra aproximación del área es mucho más precisa solamente dividiendo en 3 intervalos.

Demostración. Si dividimos $[a, b]$ en n subintervalos definidos por los $n + 1$ puntos: $a = x_0 < x_1 < \dots < x_{n-1} < x_n = b$, $\Delta x = \frac{b-a}{n}$, tenemos:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=1}^n \int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x)dx$$

En cada intervalo $[x_{k-1}, x_k]$ se aplica la regla del trapecio simple:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \sum_{k=1}^n \left[\frac{f(x_{k-1}) + f(x_k)}{2} \Delta x - \frac{f''(\xi_k)}{12} (\Delta x)^3 \right] \\ &= T_n - \frac{f''(\xi)}{12} \sum_{k=1}^n (\Delta x)^3 = T_n - \frac{f''(\xi)}{12} n(\Delta x)^3 \end{aligned}$$

Como $\Delta x = \frac{b-a}{n}$, entonces:

$$\int_a^b f(x)dx = T_n - \frac{f''(\xi)(b-a)^3}{12n^2}$$

□

3.1.1. Error de aproximación en la regla de trapecios

Este método conlleva un error absoluto que podemos acotar gracias a la siguiente expresión:

$$E_n = \left| \int_a^b f(x)dx - T_n \right| \leq \frac{K_2(b-a)^3}{12n^2} = \frac{K_2(b-a)}{12} (\Delta x)^2 \sim O(\Delta x^2)$$

donde:

$$K_2 = \max_{x \in [a, b]} |f''(x)|$$

La correspondiente demostración se obtiene simultáneamente con la propia del método:

Demostración.

$$E = \left| \int_a^b f(x)dx - T_n \right| = \left| \frac{f''(\xi)(b-a)^3}{12n^2} \right| = \frac{(b-a)^3}{12n^2} |f''(\xi)| \leq \frac{K_2(b-a)^3}{12n^2} = \frac{K_2(b-a)}{12} (\Delta x)^2$$

donde:

$$K_2 = \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|$$

□

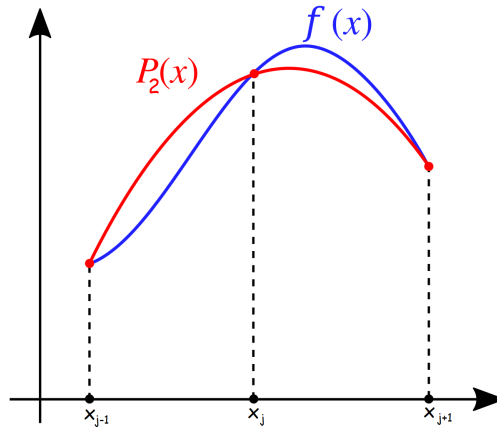
3.2. Regla de Simpson

Al igual que el anterior método, la **Regla de Simpson** es un mecanismo de integración numérica basado en funciones de interpolación (polinomios generalmente) utilizado para aproximar el valor de diversas funciones de interés. Esta regla es el resultado de combinar la regla del punto medio y la regla de los trapecios en una sola que reduzca los errores locales de la aproximación.

La regla de Simpson aproxima el área calculada por la integral en el intervalo $[x_{j-1}, x_{j+1}]$ mediante una parábola que pasa por tres puntos. En concreto:

$$x_{j-1} \quad , \quad x_j \quad , \quad x_{j+1}$$

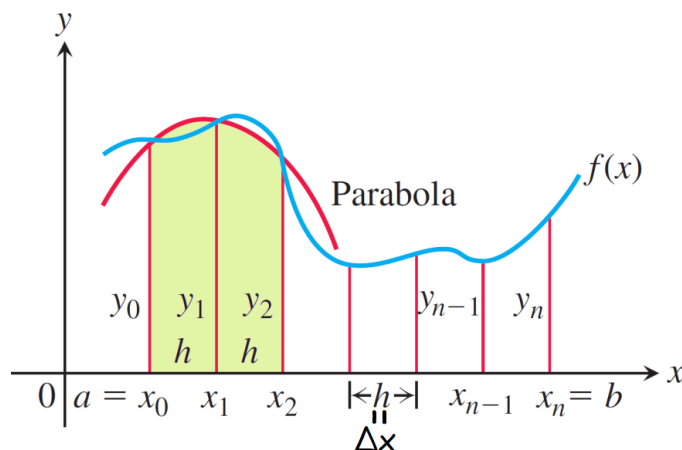
Al tratarse de una parábola, usamos como función con integral conocida (función de interpolación), el polinomio de interpolación de Lagrange de orden 2.



Esta regla tiene dos desarrollos en función de la precisión que queramos obtener y en función del número de pasos a ejecutar. Son la Regla de Simpson **simple** y la **compuesta**. Como el mayor interés de este trabajo es ver el método aplicado como parte de la resolución numérica, vamos directamente a hablar de la compuesta que es la que se utiliza a efectos prácticos.

3.2.1. Regla de Simpson compuesta

Esta regla no es más que la extensión de la regla simple para una región que no necesariamente sea el origen. Si queremos aplicarlo a una función que se extiende por el plano, el primer paso es dividir la parte del dominio de la función que queramos aproximar en un número par n de intervalos. Es decir, hay que dividir el intervalo $[a, b]$ en n subintervalos donde n es un número par. Esto es:



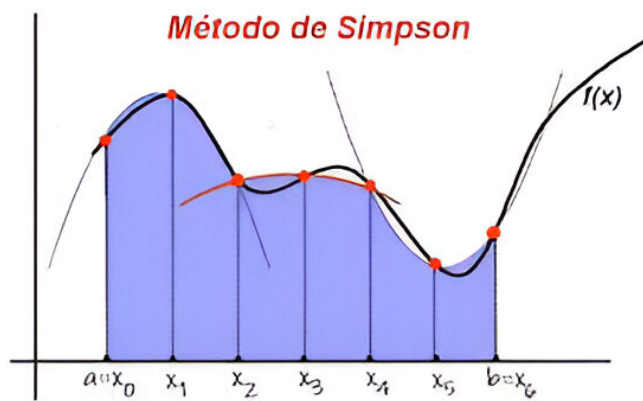
Así, podemos escribir lo siguiente:

- Las posiciones x_k corresponden a $x_k = a + \Delta x$ con $k = 0, 1, \dots, n$.
- La anchura del intervalo, que denominamos paso, es $\Delta x = \frac{b-a}{n}$.

Con estas aclaraciones y la nueva notación, podemos escribir la expresión:

$$\int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}} f(x) \cdot dx \approx A(P_k) = \frac{\Delta x}{3} (f(x_{k-1}) + 4f(x_k) + f(x_{k+1})) \quad (25)$$

Ahora, debemos observar que como n es par, es decir, $n = 2r$, ¡en nuestra aproximación vamos a tener r parábolas!



En el ejemplo vemos como tenemos 6 intervalos y sin embargo 3 parábolas.

$$(6 = 2r)$$

Con estas últimas consideraciones llegamos a la versión compuesta de este método. Básicamente consiste en aplicar la forma general de la versión simple de la regla sucesivas veces hasta cubrir la región finita que queremos aproximar.

Esto es lo que acabamos de ver, si dividimos el intervalo finito $[a, b]$ de la función que queremos aproximar en un número par $n=2r$ de subintervalos de longitud $\Delta x = \frac{b-a}{n}$, llegamos a la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) \cdot dx &\approx \sum_{k=1}^r A(P_k) = \frac{\Delta x}{3} \sum_{k=1}^r [f(x_{2k-2}) + 4f(x_{2k-1}) + f(x_{2k})] = \\ &= \frac{\Delta x}{3} [f(x_0) + 4 \sum_{k=1}^r f(x_{2k-1}) + 2 \sum_{k=1}^{r-1} f(x_{2k}) + f(x_n)] = \\ &= \frac{\Delta x}{3} [f(a) + 4 \sum_{k=1}^r f(x_{2k-1}) + 2 \sum_{k=1}^{r-1} f(x_{2k}) + f(b)] \end{aligned} \quad (26)$$

3.2.2. Error de aproximación en la regla de Simpson

En este método también podemos establecer una cota superior para el error cometido al aproximar la integral deseada. Para ello, definamos primero el error global en la etapa n .

$$E_n = \left| \int_a^b f(x) \cdot dx - S_n \right| \quad (27)$$

Ahora, sea S_n el resultado de aplicar la regla de Simpson compuesta:

$$S_n = S_{2r} = \frac{\Delta x}{3} [f(a) + 4 \sum_{k=1}^r f(x_{2k-1}) + 2 \sum_{k=1}^{r-1} f(x_{2k}) + f(b)] \quad (28)$$

Y sea $K_4 = \max_{x \in [a, b]} |f^{(4)}(x)|$. Entonces el error absoluto está acotado por:

$$E_n \leq \frac{K_4(b-a)^5}{180n^4} = \frac{K_4(b-a)}{180} (\Delta x)^4 \sim O((\Delta x)^4) \quad (29)$$

Obtenemos como resultado que la magnitud del error es del orden del paso que utilizamos a la cuarta ($O((\Delta x)^4)$). Esto quiere decir, que si $f(x)$ es un polinomio de grado 3 o inferior, ¡la regla de Simpson es exacta!

Nota

El método que acabamos de explicar también es conocido como la regla de Simpson 1/3. Existe otra variante de la regla que es la regla de Simpson 3/8, que difiere de la clásica en que esta usa polinomios de interpolación de Lagrange de 3er orden, además de que la función se tabula con cuatro puntos a igual distancia h formando

tres subintervalos.

La regla 3/8, comparada en el mismo intervalo que la 1/3, es 2.25 veces más precisa que su compañera. Aún así, en la práctica, rara vez usamos el método 3/8 debido a que el aumento de complejidad es notable (n pasa a tener que ser múltiplo de tres, necesitamos polinomios de grado 3, etc) y debido a que en la mayoría de aplicaciones el método 1/3 nos proporciona la precisión suficiente.

4. Soluciones de la Ecuación de Schrödinger

En esta sección del trabajo nos dedicaremos a obtener las soluciones de la ecuación de Schrödinger de forma numérica y compararlas con las soluciones analíticas de la misma en regiones del espacio donde existen potenciales distintos.

4.1. Pozo de potencial infinito

En este primer caso nos encontramos en una región del espacio cubierta por un potencial infinito en toda ella menos en un intervalo finito donde ese potencial tiene un valor de 0 como podemos observar en la siguiente figura:

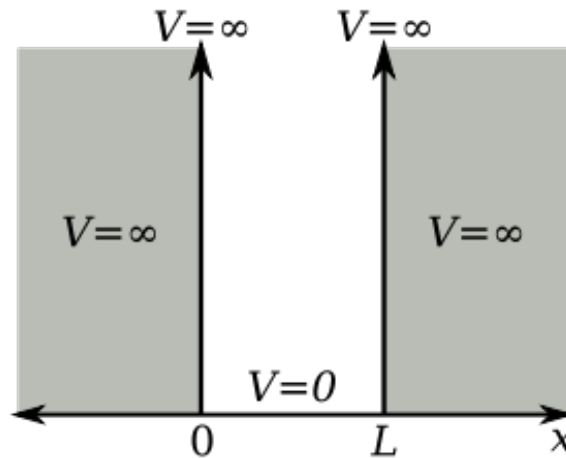


Figura 1: Pozo de potencial infinito

Una vez planteado el escenario, veamos las funciones de onda que describen a las partículas que nos podemos encontrar aquí y sus niveles de energía correspondientes.

4.1.1. Soluciones analíticas

Empecemos por hallar sus soluciones analíticas, es decir, las soluciones que obtendríamos si introducimos nuestro potencial junto con el Hamiltoniano en la ecuación de Schrödinger y resolvemos el problema de autovalores y autofunciones bajo estas condiciones.

La solución la podemos escribir según la posición de nuestra partícula:

- Para $x < 0$ y $x > L$

La función de onda debe ser nula pues para estar en esta región del espacio una partícula necesitaría energía infinita. Por tanto:

$$\psi(x) = 0$$

- Para $0 < x < L$

Para satisfacer las condiciones de contorno, la función también debe anularse en los extremos del intervalo, esto es:

$$\psi(0) = \psi(L) = 0$$

Con esto definido, en esta región la ecuación de Schrödinger toma la forma:

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

Por lo que ante este problema de Sturm-Liouville se propone la solución correspondiente para resolverlo. El resultado final y por tanto la forma de nuestras soluciones analíticas para cada nivel discreto de energía es:

$$\psi_n(x) = A \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

donde A es una constante de normalización de valor $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$ y a es el límite inferior que delimita el pozo.

Además, los mencionados niveles discretos de energía, que son los autovalores correspondientes a cada autofunción obtenida son los siguientes:

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

4.1.2. Soluciones numéricas

El método de obtención de las soluciones numéricas es análogo para las soluciones que siguen. Consiste en realizar una discretización del espacio gracias al método de diferencias finitas y construir el problema de autovalores de forma matricial. Cada solución lleva consigo su propio potencial, lo que modificará la matriz H del Hamiltoniano.

Los autovalores y las autofunciones de esta matriz son las soluciones aproximadas que estamos buscando. Los valores de las autofunciones pueden no estar normalizados, condición necesaria para que lo que estamos estudiando tenga un significado físico, aquí es donde entran los métodos numéricos de integración.

Para normalizar nuestras funciones usaremos tanto el método de los trapecios como el método de Simpson. Con estas funciones ya podremos comparar nuestras soluciones numéricas (aproximadas) con las soluciones analíticas que hemos descrito. La diferencia entre ambas se corresponderá con el error en la aproximación y en la siguiente sección trataremos este tema con detalle.

Primero visualicemos lo que hemos explicado para cada solución estudiada en este trabajo. Empecemos por el pozo de potencial infinito, donde antes que nada vamos a dejar por escrito las condiciones que utilizamos para realizar las siguientes representaciones:

El potencial $V(x)=0$ existe en la región del espacio delimitada por los límites $a=0$ y $b=5$. Ese es nuestro intervalo de trabajo. Para hacer la aproximación cogemos un $N=1000$ puntos y vamos a representar 5 funciones de onda. Los resultados han sido los siguientes:

Nota: Para mejorar la visualización del gráfico, a cada función de onda se le ha sumado dos veces su nivel de energía para que las ondas aparecieran separadas sin superponerse.

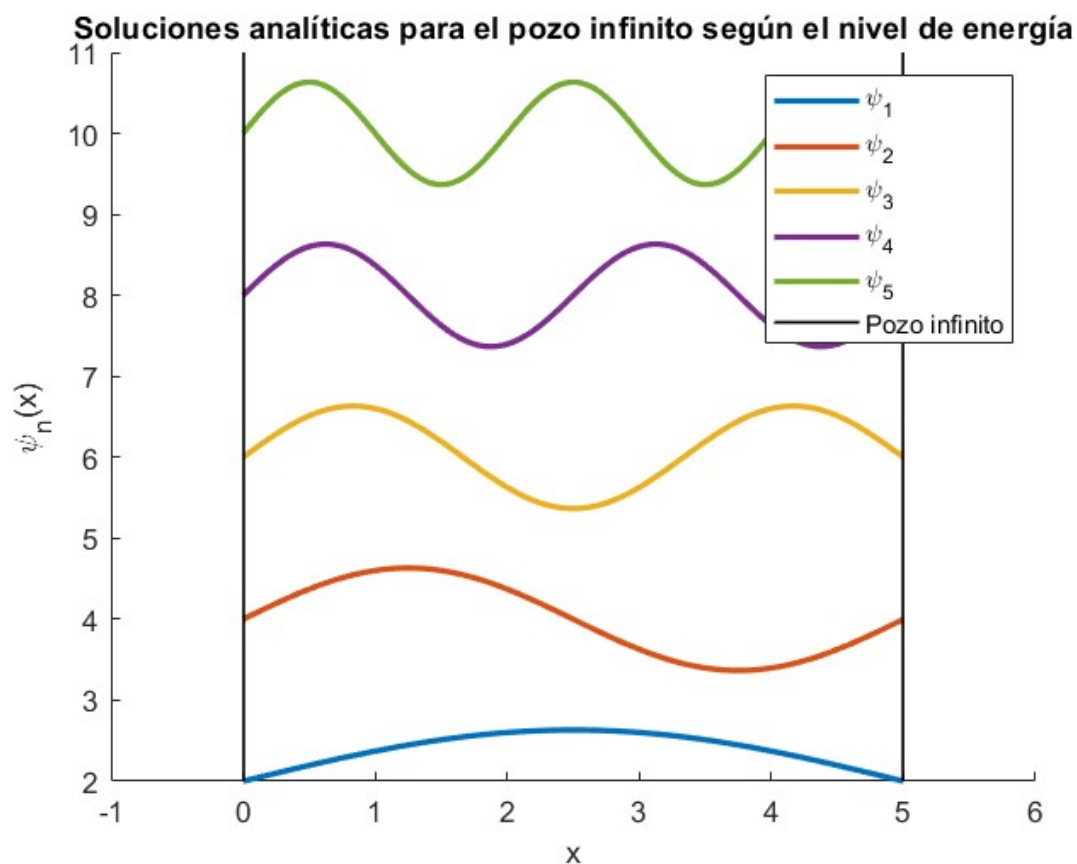


Figura 2: Funciones analíticas según el nivel de energía. En el eje horizontal representamos la región del espacio y en el vertical la función de onda más dos veces su nivel de energía ($2 \cdot n$ con $n=1,2,3,4,5$).

Soluciones numéricas normalizadas según el nivel de energía

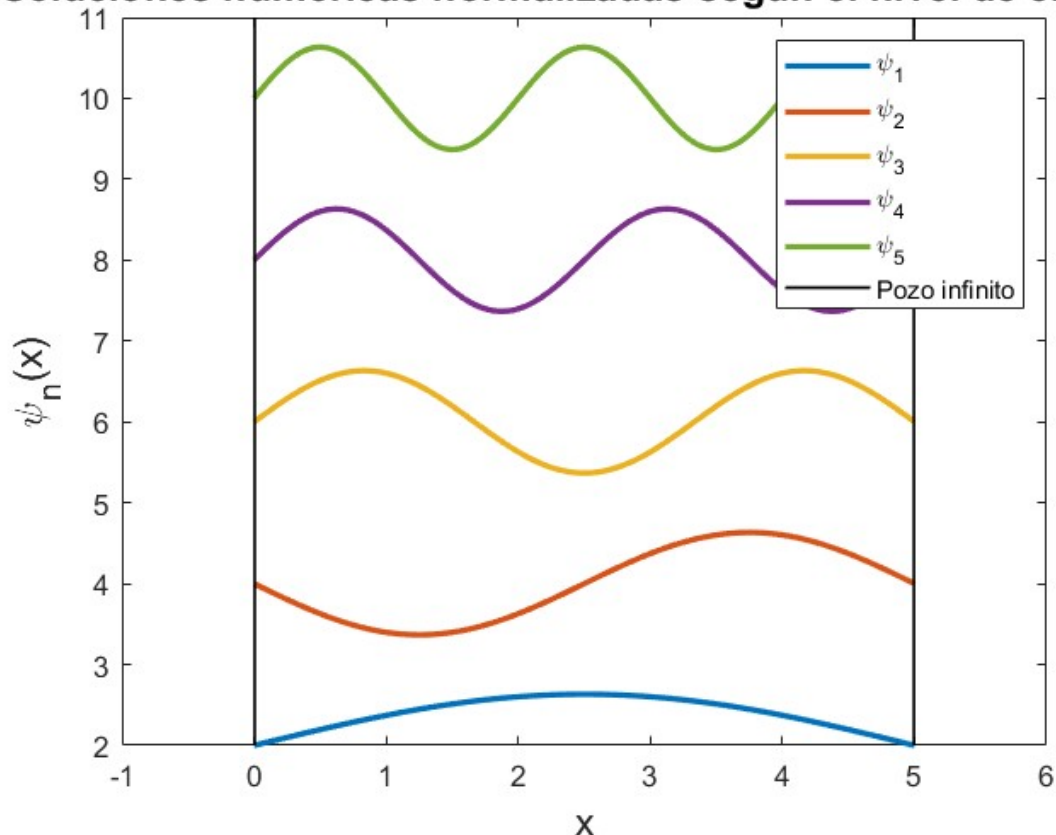


Figura 3: Funciones aproximadas por métodos numéricos según el nivel de energía. En el eje horizontal representamos la región del espacio y en el vertical la función de onda más dos veces su nivel de energía ($2 \cdot n$ con $n=1,2,3,4,5$).

En este punto y en los que siguen hay una pequeña aclaración que hay que comentar. Como hemos explicado, nosotros procedemos primero discretizando el espacio con diferencias finitas y después diagonalizando la matriz del Hamiltoniano. De esta última sacamos los autovalores y las autofunciones con la función *eig()* de MATLAB. Si recordamos algo de álgebra lineal, para un mismo autovalor, hay dos vectores propios asociados, la autofunción y su inversa (la misma autofunción pero multiplicada por -1).

Esto no nos influye a la hora de calcular los errores de aproximación, pero sí se observa en las gráficas, por lo que hay que tenerlo en cuenta. Para ejemplificar lo que estamos explicando mostremos dos niveles de energía de las autofunciones del pozo infinito en la siguiente figura:

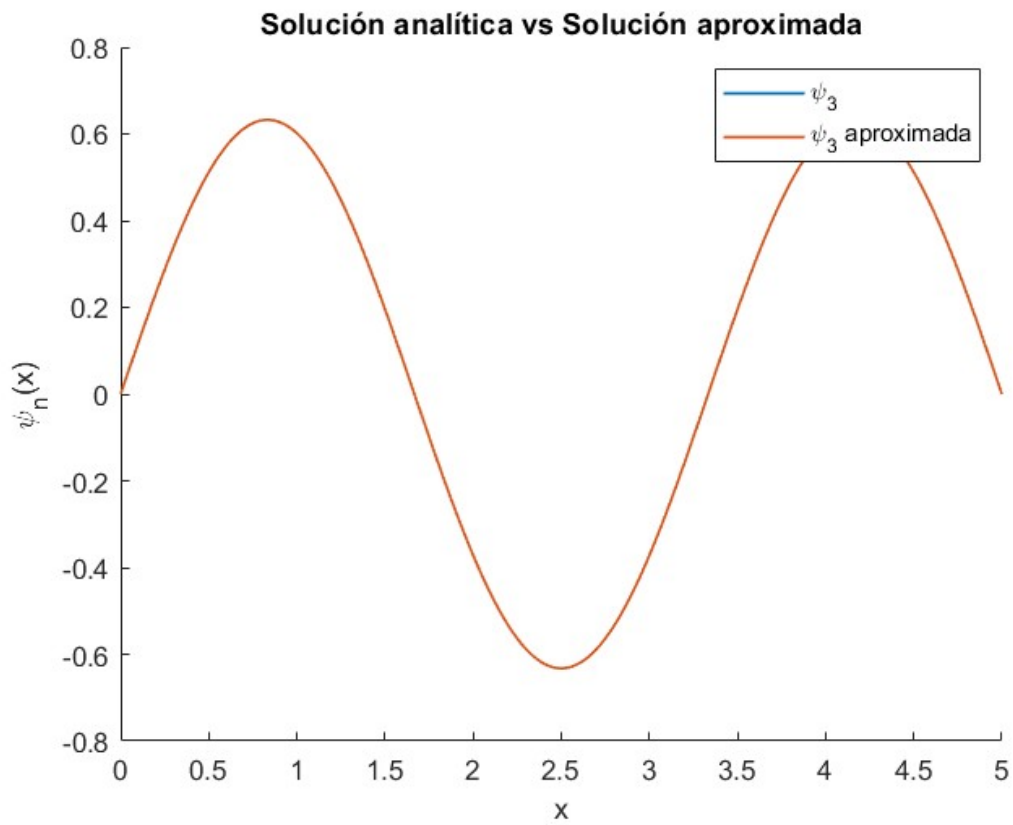
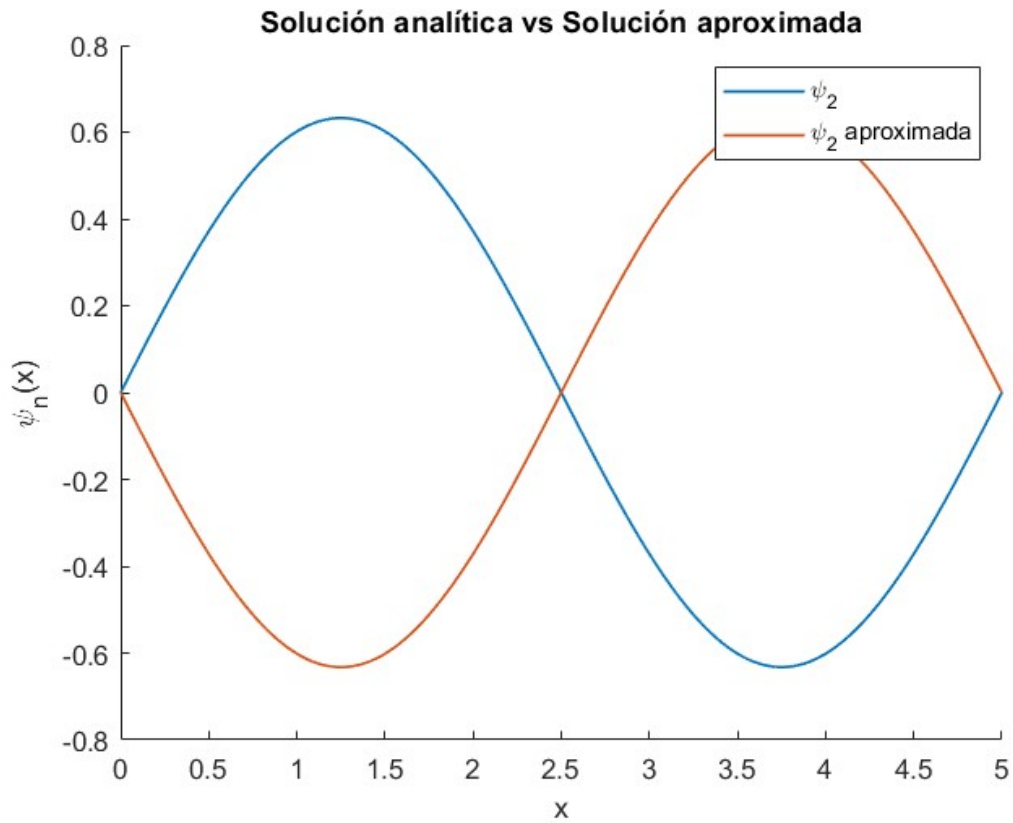


Figura 4: Encima una autofunción que resulta invertida respecto a la solución analítica. Debajo de la anterior, ambas funciones, numérica y analítica coinciden en signo.

Tras mostrar las funciones de onda, hacemos lo propio para los niveles de energía obtenidos numérica y analíticamente.

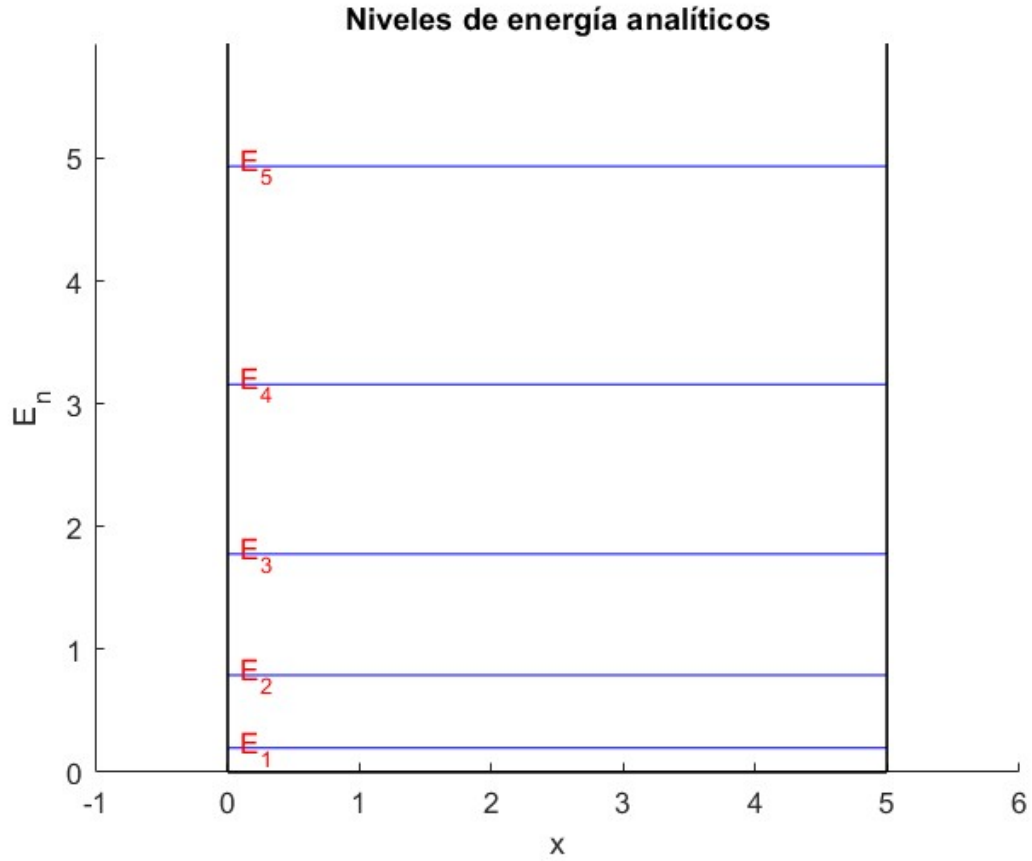


Figura 5: Niveles de energía analíticos representados a modo de esquema en la misma región que el pozo. Los niveles corresponden a $n=1,2,3,4$ y 5 .

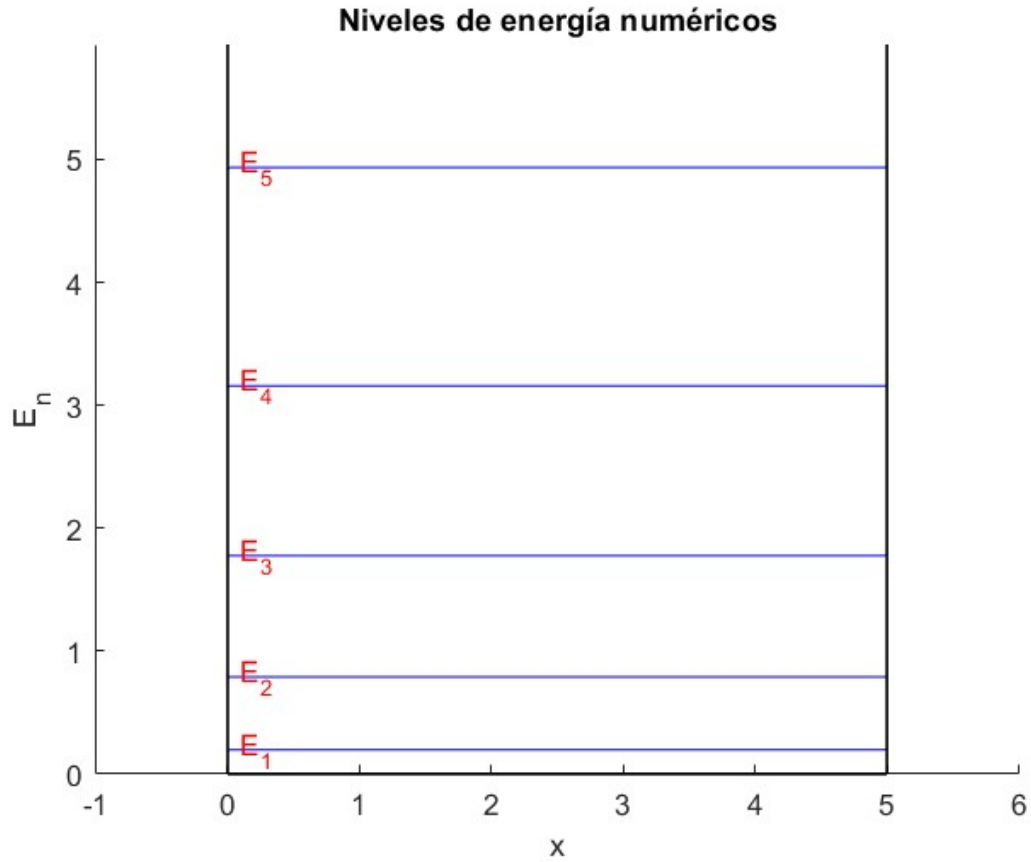


Figura 6: Niveles de energía obtenidos por métodos numéricos representados a modo de esquema en la misma región que el pozo. Los niveles corresponden a $n=1,2,3,4$ y 5.

Los valores obtenidos tanto analítica como numéricamente se recogen en la siguiente tabla:

E_n	Valor analítico	Valor numérico
E_1	0.197392088021787	0.197391925353448
E_2	0.789568352087149	0.789565749317132
E_3	1.776528792196085	1.776515615673212
E_4	3.158273408348594	3.158231764114112
E_5	4.934802200544679	4.934700530344333

Cuadro 1: Datos obtenidos de la simulación para las energías de cada función de onda. Estos datos representan los autovalores correspondientes a cada autofunción

Con esto tenemos a disposición los resultados necesarios para ver que los procedimientos han sido correctos y que la aproximación, en primera instancia, es bastante aceptable dentro de los parámetros de la simulación. Queda pendiente el análisis de los errores que se realizará en la sección 5 de este trabajo.

4.2. Oscilador armónico cuántico

El oscilador armónico tiene una gran importancia en la física y se utiliza en una amplia gama de campos debido a su capacidad para modelar una variedad de fenómenos naturales.

Clásicamente, un oscilador armonioso se describe por la posición $x(t)$ de una partícula de masa m y su momento $p(t)$. La energía E de una partícula con posición y momento viene dada por $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$. Donde ω es la frecuencia angular del sistema y viene dada por $\omega = \frac{2\pi}{T}$ y T es el periodo de oscilación del sistema. Para este caso también se cumple que $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ ya que la partícula de masa m siente una fuerza de atracción dada por $F = -kx$, siendo k la constante elástica.

El problema con este oscilador clásico es que no podemos usarlo para describir sistemas donde los efectos cuánticos sean considerables, para solucionar esto convertimos nuestro momento y posición en los operadores hermíticos \hat{x} y \hat{p} . Con estos nos construimos nuestro Hamiltoniano que inspirado en la energía clásica queda:

$$H \equiv \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \quad (30)$$

Por lo tanto la ecuación de Schrödinger independiente del término para este Hamiltoniano queda:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) = E\psi(x) \quad (31)$$

Esta ecuación tiene como solución analítica las funciones de onda ya normalizadas:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n! \cdot \pi^{\frac{1}{4}}}} \cdot H_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}} \quad (32)$$

Siendo los H_n los correspondientes polinomios de Hermite, que son polinomios ortogonales con la siguiente forma:

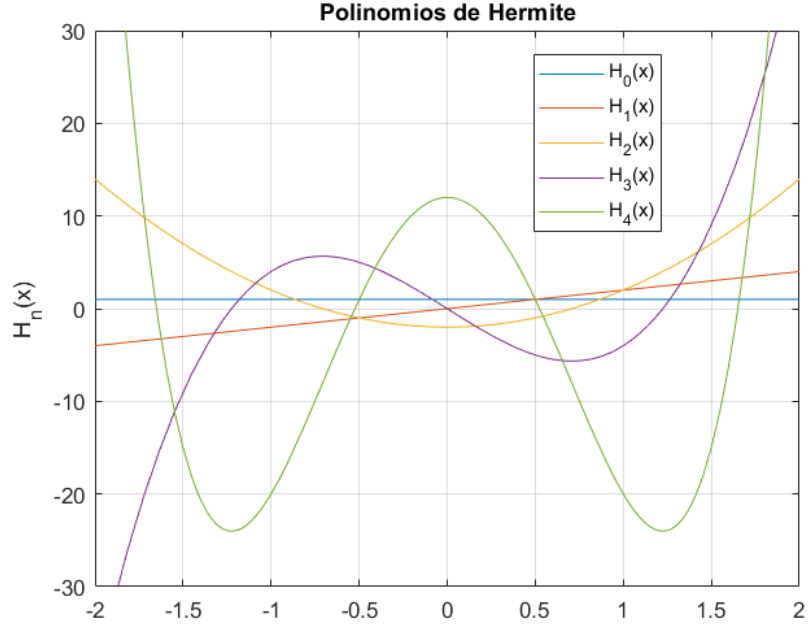


Figura 7: Cuatro primeros polinomios de Hermite.

Con energías asociadas de la forma:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (33)$$

Para nuestras soluciones numéricas usaremos la frecuencia del oscilador $\omega = 1$ la constante de Planck $\hbar = 1$ y la masa $m = 1$ con el objetivo de facilitar los cálculos.

Definimos nuestro potencial como $V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ y trabajamos en el intervalo $[-8,8]$ dividido en 1000 puntos, ya que con estos parámetros nuestra solución es lo suficientemente precisa y no lleva un tiempo de computación excesivamente largo.

De nuestro método de diferencias finitas obtenemos las siguientes energías:

E_n	Solución Numérica	Solución Analítica
E_0	0.499991	0.500000
E_1	1.499959	1.500000
E_2	2.499895	2.500000
E_3	3.499800	3.500000
E_4	4.499671	4.500000
E_5	5.499511	5.500000
E_6	6.499319	6.500000
E_7	7.499094	7.500000
E_8	8.498838	8.500000
E_9	9.498549	9.500000
E_{10}	10.498228	10.500000
E_{11}	11.497875	11.500000
E_{12}	12.497490	12.500000
E_{13}	13.497075	13.500000
E_{14}	14.496624	14.500000
E_{15}	15.496143	15.500000

Cuadro 2: Tabla de soluciones de energías del OAC.

Se puede apreciar un ligero error de nuestras soluciones. Esto es debido al error propio del método de diferencias finitas, ya que nuestro paso en este caso era de $h = 0,16$.

Ahora mostraremos nuestros autovectores obtenidos de manera numérica, pero es importante resaltar que estos acumulan el error de diferencias finitas y del método que usamos para la normalización de estos, en este caso usaremos Simpson porque ese la que menos error presenta. Sin embargo, esto será expuesto más adelante en la sección de estudio de errores.

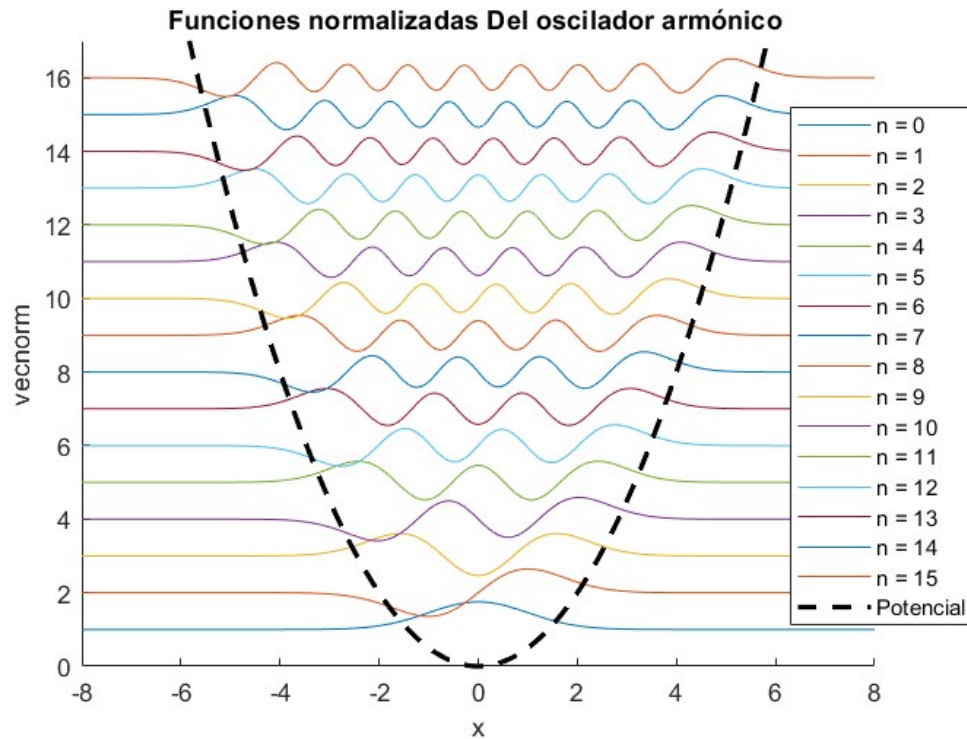


Figura 8: Se muestran los 16 vectores normalizados.

Aquí cada nivel lo hemos separado sumando a cada función su nivel de energía más uno para que fuese más legible pero realmente todas tienden a 0 en los extremos y están normalizadas.

Además nuestro código de diferencias finitas nos devolvía los vectores con un desfase de π como ya fue expuesto en el pozo infinito así que también hubo que ajustarlo.

Si nos acercamos al punto marcado podemos ver que nuestra función para el nivel 15 no es exactamente igual que la solución analítica pero es un error muy pequeño como para que podamos apreciarlo, este punto es uno de los que más difiere puesto que a mayor nivel de energía más error nos encontramos. Esto también era visible en los errores de energía, a mayor error en la autovector mayor error en su autovalor asociado.

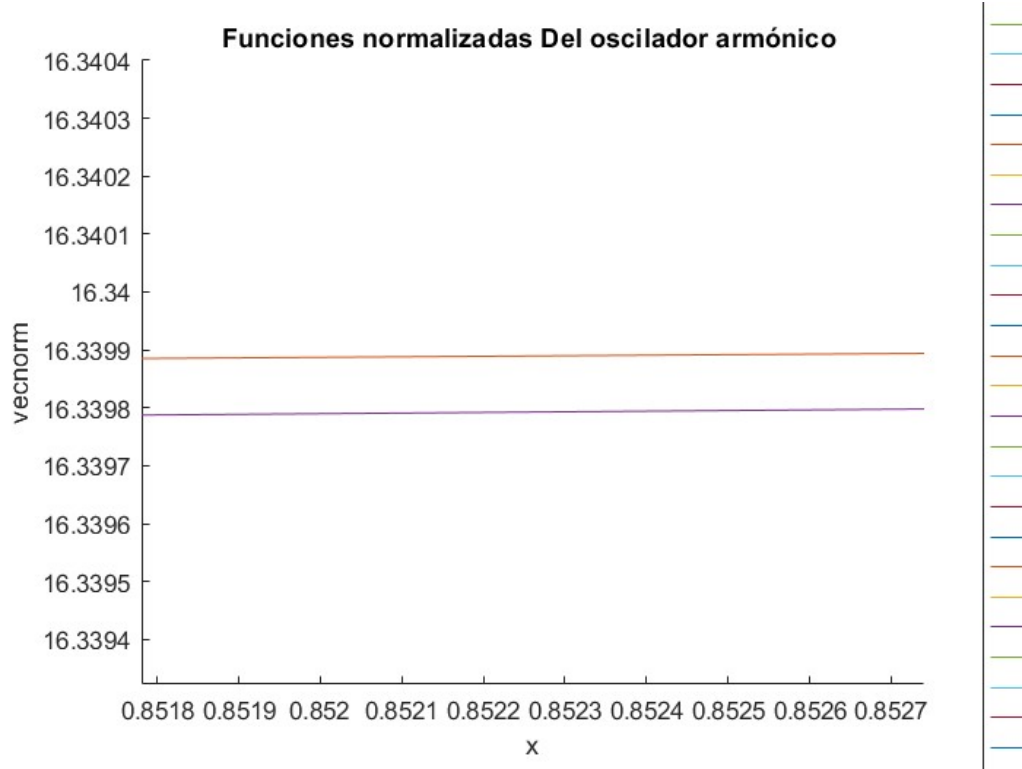


Figura 9: Diferencia analítica y numérica.

4.3. Pozo de potencial finito

4.3.1. Soluciones analíticas

Características principales

Un pozo de potencial finito es una de las estructuras básicas utilizadas en física cuántica para observar el comportamiento de la función de onda de una partícula. Este pozo viene descrito por el siguiente potencial:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } -\infty < x \leq -a \\ -V_0 & \text{si } -a \leq x \leq a \\ 0 & \text{si } a \leq x < \infty \end{cases} \quad (34)$$

Siendo V_0 positivo.

Si resolvemos la ecuación de autovalores del Hamiltoniano vamos a obtener diferentes soluciones en función del tramo en el que nos encontremos y dependiendo de si la función es par o impar. Por simplicidad, vamos a clasificarlas en función de si la solución es par o impar:

Si la solución es par obtenemos:

$$\psi^{(+)}(x) = \begin{cases} Ce^{\beta x} & \text{si } -\infty < x \leq -a \\ A \cos(\alpha x) & \text{si } -a \leq x \leq a \\ Ce^{-\beta x} & \text{si } a \leq x < \infty \end{cases} \quad (35)$$

Por otra parte, si la solución es impar tendremos:

$$\psi^{(-)}(x) = \begin{cases} -Ce^{\beta x} & \text{si } -\infty < x \leq -a \\ B \sin(\alpha x) & \text{si } -a \leq x \leq a \\ Ce^{-\beta x} & \text{si } a \leq x < \infty \end{cases} \quad (36)$$

Donde A, B y C son las constantes de normalización y α y β vienen definidos como:

$$\alpha = \frac{\sqrt{2m(|V_0| - |E|)}}{\hbar} \quad ; \quad \beta = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}$$

Como vemos, las constantes de normalización dependen de los valores de la energía y de V_0 . Es decir, variarán según cómo se haya construido el pozo. En la siguiente sección hablaremos sobre el pozo que vamos a analizar y el valor de las constantes de normalización.

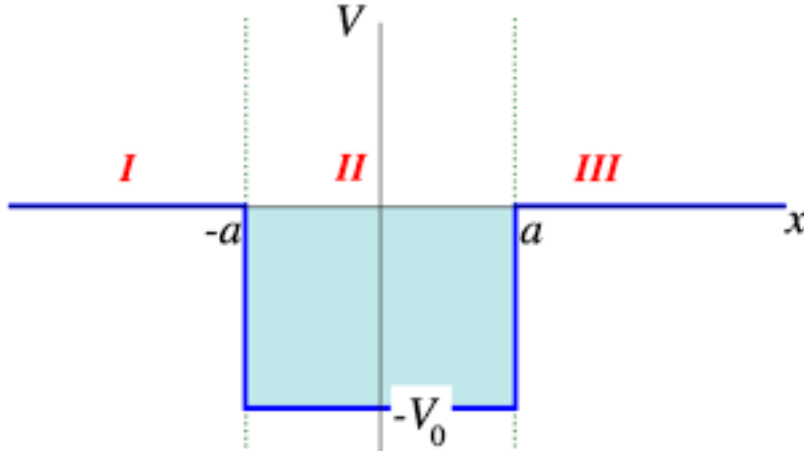


Figura 10: Pozo de potencial finito

4.3.2. Construcción del pozo de potencial

Para este pozo se ha usado el valor para la profundidad del pozo de: $V_0 = 50$ (unidades arbitrarias). Además, como en el ordenador no podemos incluir el infinito como en la definición formal, hemos decidido usar como aproximación en los extremos de análisis ± 8 ya que, como veremos más adelante, con poner estos intervalos como aproximación es suficiente para ver sin problemas el comportamiento de las funciones de onda para este potencial. Por último, hemos decidido situar el pozo en la región de -5 a 5.

Teniendo todo esto en cuenta, hemos obtenido las siguientes constantes de normalización: $A = B = 0,44$ y $C = \pm 6,1 \cdot 10^{14}$. Para ello, hemos usado la definición de normalización:

$$\int_a^b \psi^*(x)\psi(x) dx = 1 \quad (37)$$

Un apunte importante es que para todos los cálculos se ha considerado que $\hbar = m = 1$.

A continuación, en la siguiente sección mostraremos las soluciones numéricas y las compararemos con las obtenidas analíticamente.

4.3.3. Soluciones numéricas

Las soluciones numéricas han sido obtenidas para un número $N=1000$ puntos y un total de 5 funciones. Las soluciones analíticas para esas funciones son:

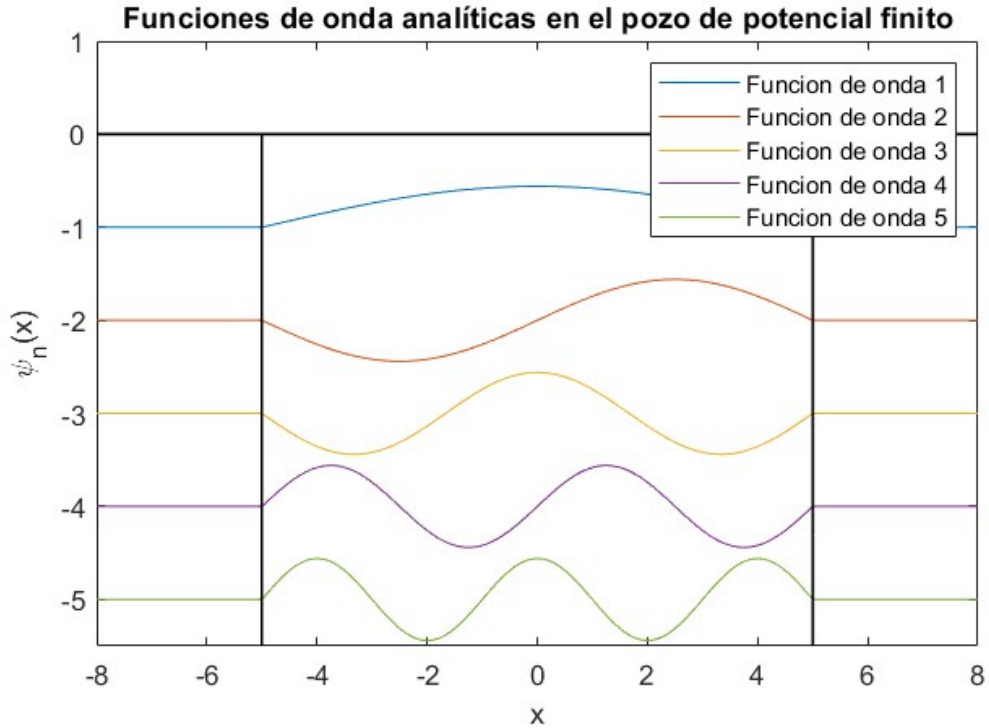


Figura 11: Primeras 5 soluciones analíticas del pozo de potencial finito

Mientras que las soluciones numéricas son las siguientes:

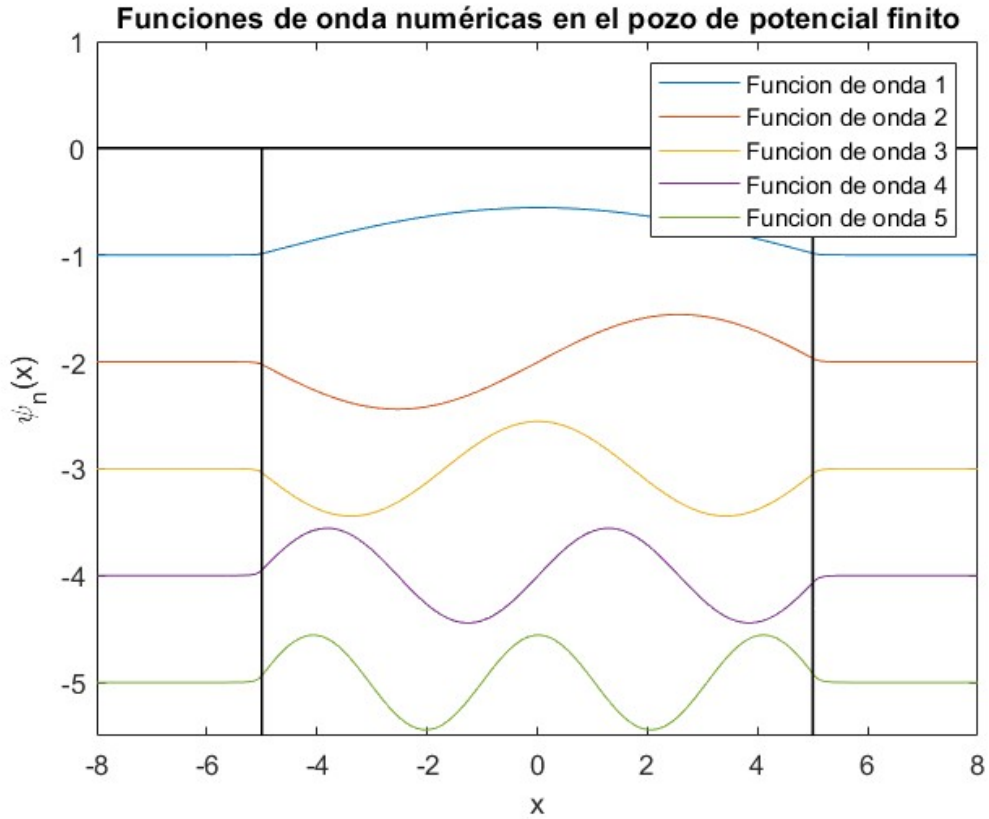


Figura 12: Primeras 5 soluciones numéricas del pozo de potencial finito

Como es fácilmente observable, las aproximaciones numéricas son bastante aceptables. Algo que confirmaremos en el tratamiento de errores.

Además, hemos equiespaciado dentro del pozo las funciones de onda por dos motivos: El primero es que es más sencilla la visualización de todas las ondas de este modo; Y el segundo es debido a que, como veremos a continuación, la energía que transporta esta función de onda es negativa. Esto quiere decir que estamos estudiando estados ligados y, por tanto, la mejor manera para visualizar estos estados es con las funciones de onda dentro del pozo, no por encima de él.

Con esta aclaración hecha, vamos a proceder a enseñar las energías analíticas y numéricas con su respectiva tabla de errores:

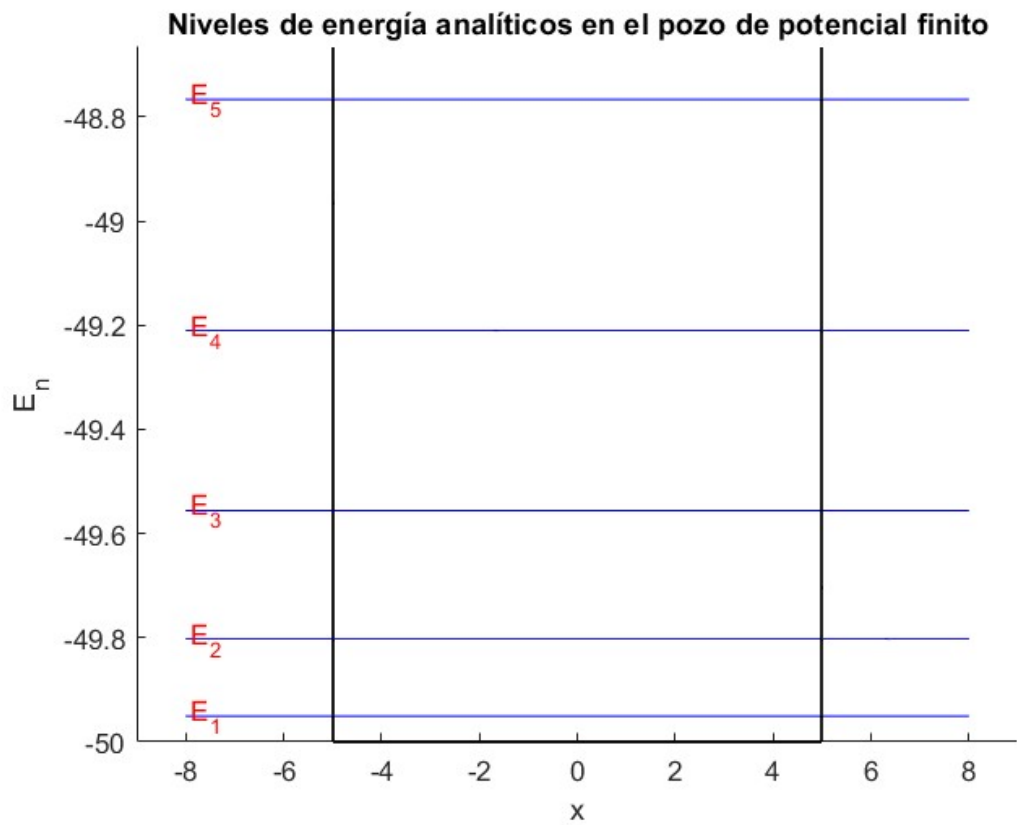


Figura 13: 5 primeras energías analíticas para el pozo de potencial finito

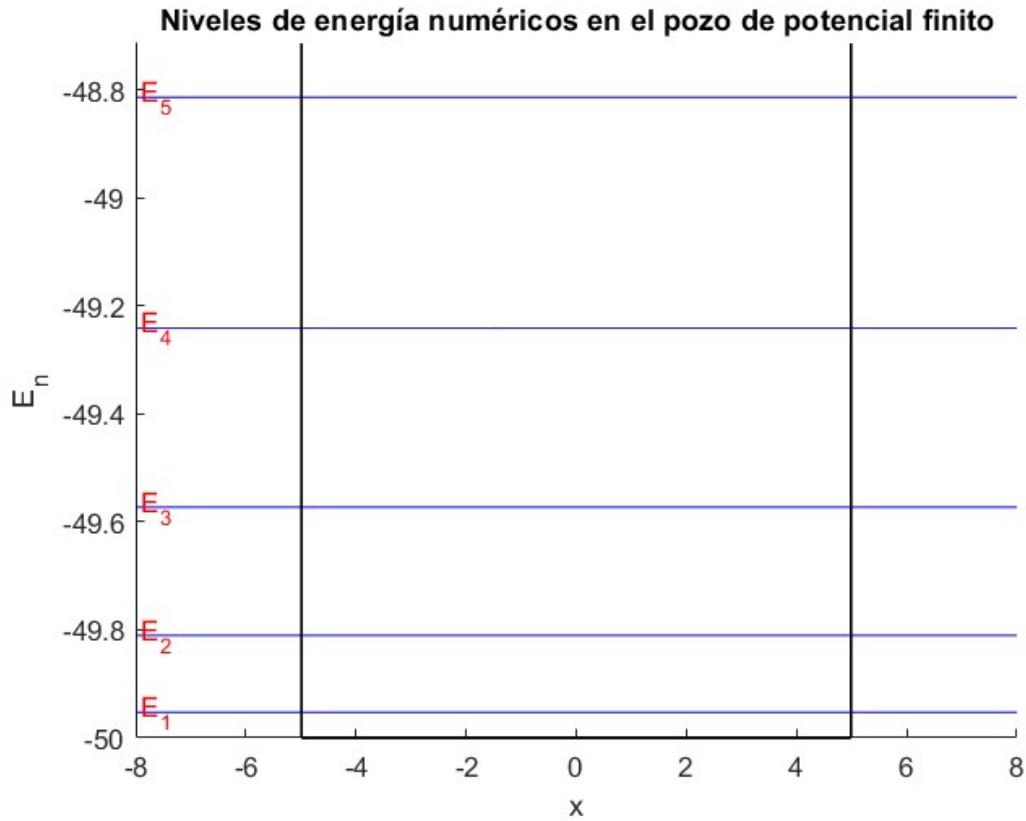


Figura 14: 5 primeras energías numéricas para el pozo de potencial finito

La tabla de errores nos arroja los siguientes resultados:

Nivel de energía(E_n)	Energía analítica	Energía numérica
1	-49,95065198	-49,95251866
2	-49,80260791	-49,81007930
3	-49,5558678	-49,57269590
4	-49,21043165	-49,24039191
5	-48,76629945	-48,81320046

Cuadro 3: Energías del pozo de potencial finito.

Vemos que, según la energía va siendo mayor, el error se hace cada vez más grande. El principal motivo es que, como ya ha sido mencionado antes, las energías analíticas se obtienen a partir de una aproximación a la solución real. Con lo cual, esto provoca que la discrepancia entre resultados sea mayor. Sin embargo, debido a que el orden de error es bastante bajos, podemos dar como válidas nuestras soluciones numéricas.

5. Estudio de errores para las soluciones obtenidas

En esta sección vamos a centrarnos en estudiar los errores que cometemos a la hora de aproximar las soluciones, es decir, trataremos de ilustrar el error que tienen asociado los métodos numéricos que hemos empleado para obtener los resultados que hemos mostrado en el trabajo.

Los parámetros de la simulación se indicarán en cada apartado pero el procedimiento será general para sendos. Primero calcularemos el error como describimos a continuación y lo representaremos en función del paso o del número de puntos dependiendo del apartado (un caso es análogo al otro). Posteriormente transformaremos esa gráfica a la misma pero tomando logaritmos en ambos miembros para una mejor visualización.

La forma que vamos a seguir para estudiar el error será calcular la raíz del error cuadrático medio tanto de energías como de funciones para diferentes pasos. Teóricamente, según se reduce el paso, el error cometido también debe descender, para comprobar esto graficaremos nuestros resultados y veremos si siguen esta tendencia.

La raíz del error cuadrático medio (RMSE) para las energías será:

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (E_i - \hat{E}_i)^2}$$

Donde:

- n es el número de niveles.
- E_i es la energía analítica del nivel i .
- \hat{E}_i es la energía numérica del nivel i .

La raíz del error cuadrático medio (RMSE) para las autofunciones se calculara como:

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (\psi_n(x_k) - \hat{\psi}_n(x_k))^2}$$

Donde:

- n es el número de niveles.
- $\psi_i(k)$ es la autofunción analítica en el nivel i evaluada en el punto x_k .
- $\hat{\psi}_i(k)$ son las autofunciones numéricas en el nivel i evaluada en el punto x_k .

5.1. Pozo de potencial infinito

5.1.1. Error en las energías

A continuación se va a representar como varía el error en los niveles de energía en función del número de puntos que tomemos para realizar la discretización del espacio (cuantos más puntos, menor será el paso, por lo que se podría hacer un gráfico análogo del error en función del paso). Para la simulación vamos a coger valores de N comprendidos entre 10 y 500.

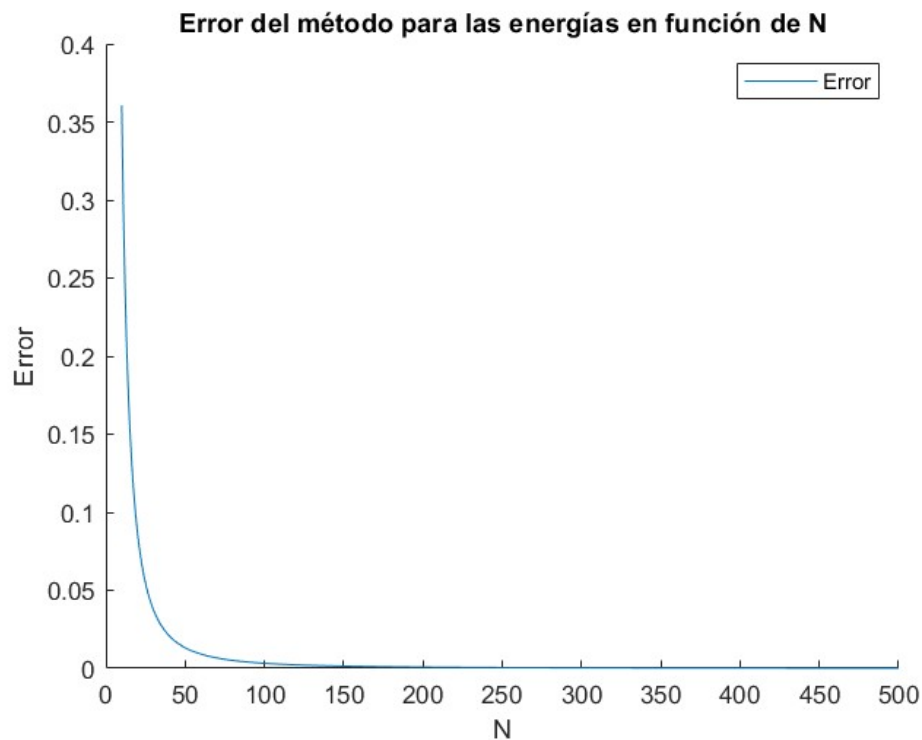


Figura 15: Raíz del error cuadrático medio en las energías (Error), según el número de puntos (N).

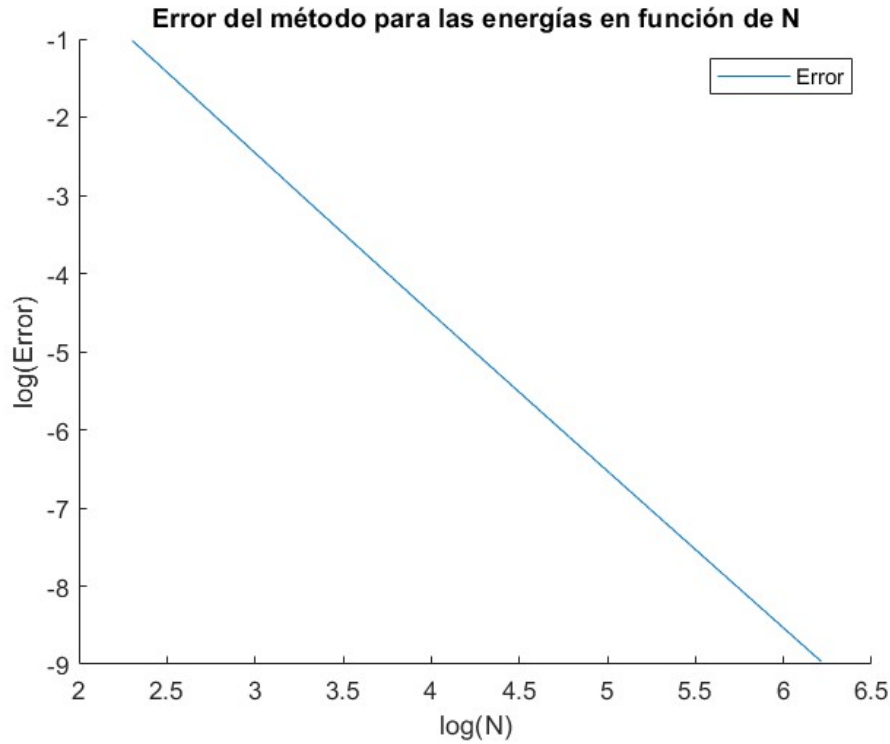


Figura 16: Logaritmo de la raíz del error cuadrático medio en las energías ($\log(\text{Error})$), según el logaritmo del número de puntos ($\log(h)$).

5.1.2. Error en las funciones

Y ahora se mostrará la evolución del error para las funciones según el número de puntos. Al igual que antes, N tomará valores desde 10 hasta 500. La normalización de las funciones se ha hecho mediante el método de Simpson para la integración numérica.

5.2. Oscilador armónico cuántico

5.2.1. Error en las energías

A continuación mostraremos como evoluciona el error en las energías en función del paso que utilicemos en nuestros métodos de aproximación. Lo realizaremos viendo como varía el mismo si dividimos el espacio con N puntos donde N toma valores desde 10 hasta 500.

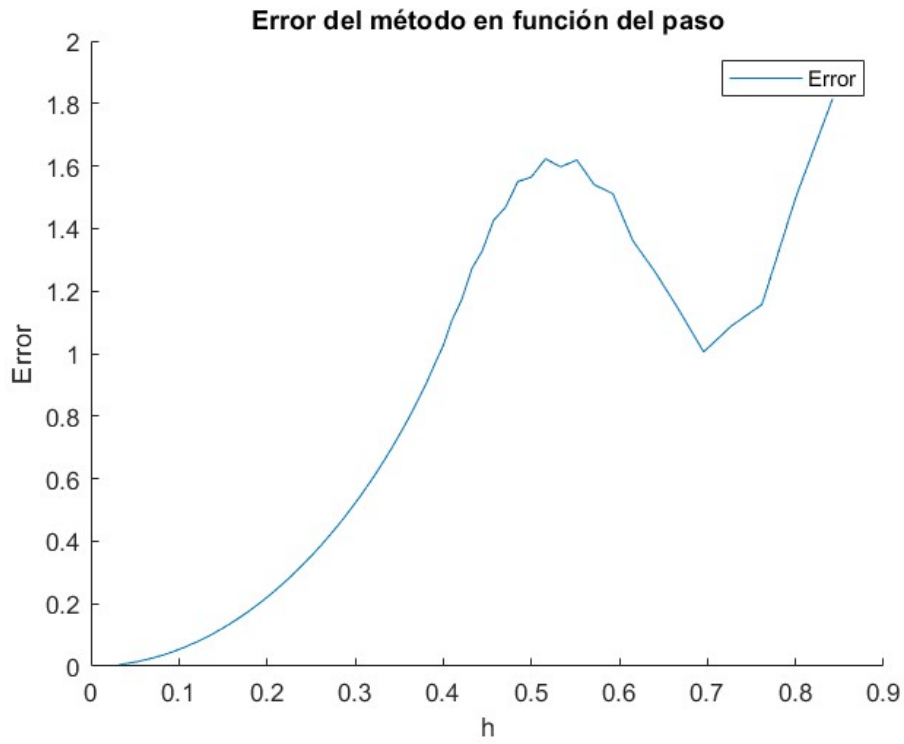


Figura 17: Raíz del error cuadrático medio en las energías (Error), según el paso (h).

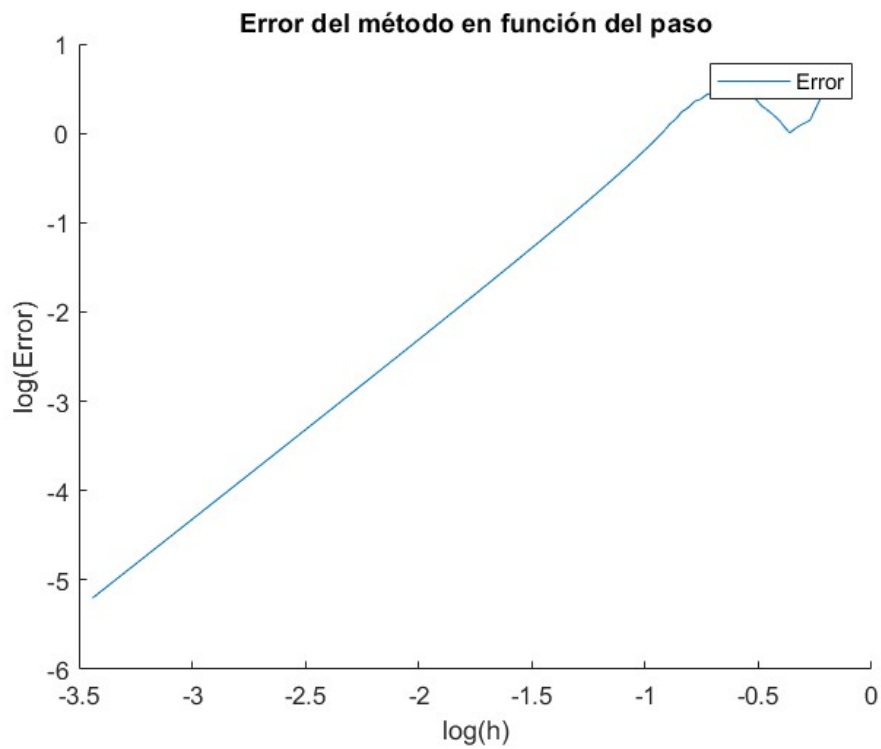


Figura 18: Logaritmo de la raíz del error cuadrático medio en las energías ($\log(\text{Error})$), según el logaritmo del paso ($\log(h)$).

5.2.2. Error en las funciones

Ahora mostraremos la evolución del error en las funciones en función, como anteriormente, del paso. Aclaremos aquí que se elige el método de Simpson para normalizar las autofunciones que comparamos con las analíticas. Los valores de N permanecen igual que para el apartado de las energías (de 10 a 500).

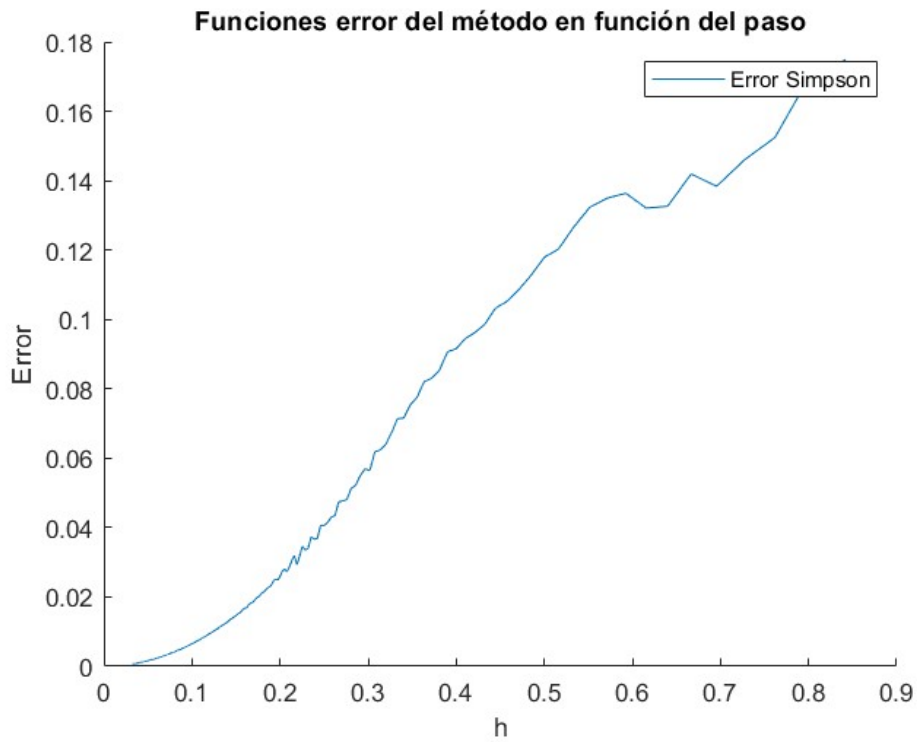


Figura 19: Raíz del error cuadrático medio en las funciones (Error), según el paso (h).

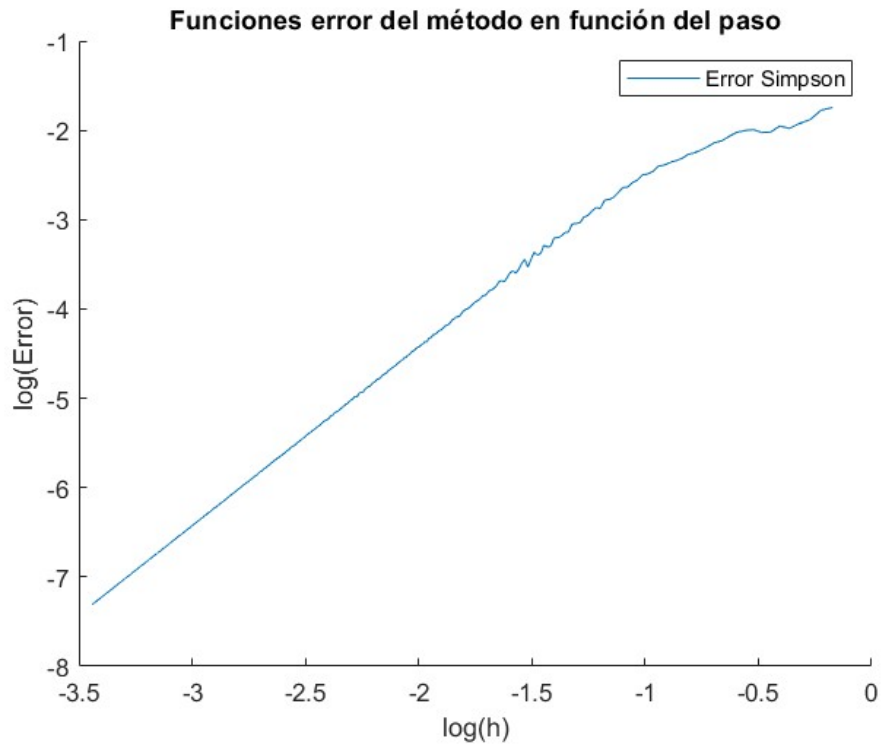


Figura 20: Logaritmo de la raíz del error cuadrático medio en las funciones ($\log(\text{Error})$), según el logaritmo del paso ($\log(h)$).

5.3. Métodos de integración

Esta sección es de verdadero interés pues representa un tipo de inconveniente que nos hemos encontrado realizando el trabajo. Nuestro código es capaz de realizar la normalización de las autofunciones tanto con el método de los trapecios como con el de Simpson. Sin embargo, cuando representamos la convergencia de uno frente a la de otra nos encontramos con lo siguiente:

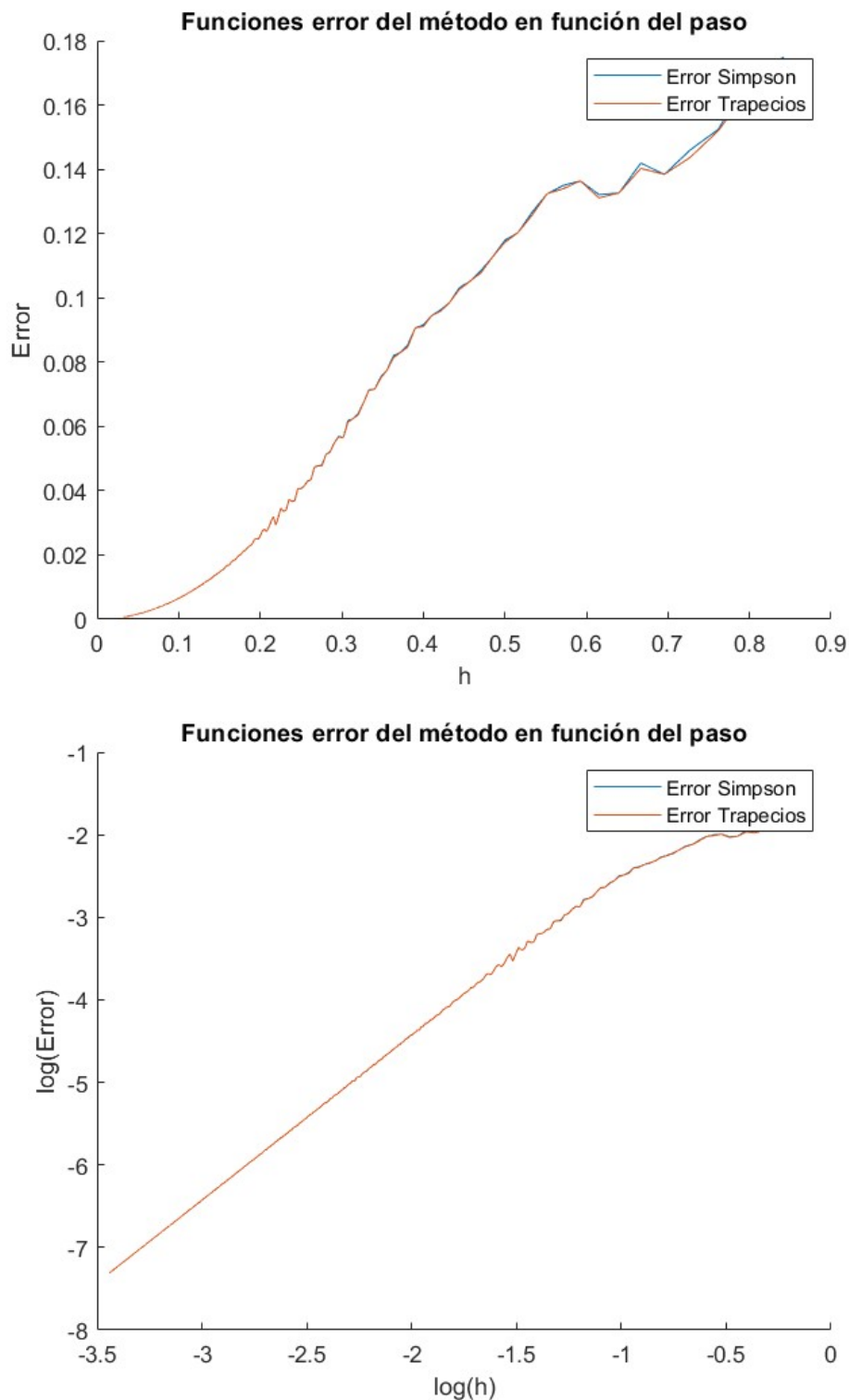


Figura 21: Encima el error de ambos métodos en función del paso. Debajo la misma gráfica pero tomando logaritmos en las variables de los ejes.

¡Nos encontramos con que ambos métodos nos ofrecen la misma convergencia! ¿Como es esto posible?, el error del método de Simpson es de orden h^4 mientras que el de trapecios va como h^2 . Después de comprobar si existían errores que pudieran llevar a conclusiones equivocadas, encontramos un motivo del por qué esto puede

ser así.

Cuando el método de diferencias finitas nos devuelve las autofunciones sin normalizar, estas ya poseen un error asociado este método numérico, precisamente de orden h^2 . Nosotros realizamos la normalización de estos autovectores con dos métodos distintos, sí, pero en ambos casos esos vectores proceden del mismo sitio con el mismo error de procedencia.

Esto puede provocar entonces que los dos métodos de integración se comporten igual a la hora de normalizar y desde luego explicaría la razón de por qué al graficar el error de uno frente al del otro ambos se comporten igual.

6. Consideraciones: Ecuación dependiente del tiempo

Es importante mencionar que una vez resuelta nuestra ecuación independiente del tiempo ahora nos sería posible resolver la ecuación dependiente del tiempo. Esta ecuación es:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x, t) \Psi(x, t) \quad (38)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = H \Psi(x, t) \quad (39)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = E \Psi(x, t) \quad (40)$$

Vemos que en esta ecuación ya conocemos las energías debido a que estas son invariantes en el tiempo, por tanto, nuestro problema se convierte en el cálculo de una ecuación diferencial. Para resolverlo podemos usar por ejemplo el método de Runge-Kutta y como condiciones iniciales establecemos las funciones de onda a tiempo $t = 0$ $\Psi(x, 0)$ que serán nuestras funciones $\Psi(x)$ ya que si suponemos las soluciones estacionarias:

$$\Psi(x, t) = \Psi(x)g(t)$$

$$g(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Et} \text{ por tanto } g(0) = 1$$

$$\Psi(x, 0) = \Psi(x)$$

7. Anexo

7.1. Códigos de MATLAB

Adjunto con este trabajo, se envía el fichero de archivos que se ha utilizado para realizar todas las simulaciones descritas aquí, tanto las pertinentes a graficar las soluciones como las que se encargan de realizar el análisis de errores.

Con el objetivo de que el código sea reutilizable y capaz de estudiar las soluciones de la Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, se ha realizado a modo de interfaz un script en concreto que ha de ejecutarse en pos de observar lo que el usuario desee.

Este script inicial es *THE_MAIN.tex*, el cual a la hora de ejecutarse le pedirá al usuario lo que desea visualizar, haciéndole elegir entre realizar un estudio de:

- Soluciones: El usuario entonces deberá ingresar los límites del dominio, el número de puntos con los que dividir el espacio y el número de autofunciones que debe mostrar.
- Errores: A lo anterior hay que añadirle el número mínimo de puntos (el cual no debe ser inferior a 10) y el máximo para ver como evoluciona el error según el paso de discretización (a menos puntos, mayor el paso). Como se enseñará el error en las energías y el error en las funciones, para este segundo el programa también pedirá si la normalización se hará mediante el método de los trapecios o mediante el método de Simpson.