

Solución numérica de la ecuación de Schrödinger 1D

KEVIN CORTÉS G.^{1,*} AND SANTIAGO QUINTERO C.^{1,**}

¹Facultad de ciencias exactas y naturales, Universidad de Antioquia, Calle 67 No 53-108, Medellín, Antioquia

*E-mail: kevin.cortes@udea.edu.co

**E-mail: santiago.quintero@udea.edu.co

Compiled November 5, 2020

En este trabajo, se presenta de manera detallada un algoritmo en Python, para encontrar las soluciones numéricas de la ecuación de Schrödinger unidimensional. Adicionalmente se emplea el método para obtener los autovalores de energía y las funciones de onda de los estados ligados de sistemas físicos importantes con aplicaciones, tales como: un electrón confinado en un pozo finito e infinito, y la interacción de un muon con un núcleo de plomo.

Palabras clave: Ecuación de Schrödinger, solución numérica, pozo de potencial, oscilador armónico, mecánica cuántica, Python.

1. INTRODUCCIÓN

En el Presente trabajo, se elabora en Python un programa basado en objetos para obtener soluciones de la ecuación de Schrödinger 1D. Para la solución se usa el método de diferencias finitas, que permite llevar la ecuación diferencial a una ecuación matricial, que también es una ecuación de autovalores de la matriz hamiltoniana que resulta, además, usando el módulo linalg, de la librería numpy de Python se obtiene los autovalores y autovectores de la ecuación matricial de autovalores.

El artículo se encuentra organizado como sigue: en la sección II se introduce la ecuación de Schrödinger, así como algunas propiedades generales de las funciones de onda y de los autovalores de energía, en la sección III, se presenta el método numérico necesario para la solución, en la sección IV, se presenta el algoritmo, en la sección V, usando el algoritmo, se soluciona la ecuación de Schrödinger para tres sistemas particulares y se analizan sus resultados, en la sección VI, se discute la funcionalidad y generalidad del método, por último en el apéndice I se muestran las funciones de onda en diferentes tiempos de estados estacionarios superpuestos.

2. ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

La ecuación de Schrödinger, es una ecuación que describe la dinámica de un sistema mecánico cuántico, esta es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}$$

donde $V(\mathbf{r})$ es el potencial de interacción que hay en el sistema, y $\Psi(\mathbf{r}, t)$ es la función de onda.

En el caso unidimensional, queda como sigue:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(z, t)}{\partial z^2} + V(z) \Psi(z, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(z, t)}{\partial t} \quad (1)$$

usando el método de separación de variables, obtenemos que:

$$\Psi(z, t) = \psi(z) e^{-iEt/\hbar} \quad (2)$$

Donde $\psi(z)$ y E son las autofunciones y autovalores respectivamente, que satisfacen la siguiente ecuación de autovalores:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(z)}{dz^2} + V(z) \psi(z) = E \psi(z) \quad (3)$$

La anterior ecuación se conoce como la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

La ecuación (3) también se puede escribir como:

$$\hat{H} \Psi(z, t) = E \Psi(z, t) \quad (4)$$

con

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V(z)$$

conocido como el operador Hamiltoniano del sistema.

propiedades de Ψ

La función de onda debe ser uniforme y continua en todo el espacio, incluso para los casos en que el potencial presenta discontinuidades, la función de onda y su derivada son continuas, y en las regiones del espacio donde $V(z) = \infty$, $\psi = 0$, por lo que la condición de continuidad exige que la función de onda se anule en la frontera del dominio, y para este caso las derivadas ψ presentan una discontinuidad finita (ver [1]).

sea Ψ_1 y Ψ_2 soluciones de la ecuación (1), entonces, la suma $\Psi_1 + \Psi_2$ también es solución de dicha ecuación, este es el llamado principio de superposición que es consecuencia de la linealidad de la ecuación (1).

El módulo cuadrado de la función de onda ($|\Psi|^2$) es una función densidad de probabilidad

propiedades de E

Los autovalores de energía E pueden ser continuos o discretos, degenerados o no. Además $E > V_{min}$.

En el caso unidimensional (Ec. (1)) ningún autovalor del espectro discreto es degenerado (ver [1])

3. MÉTODO NUMÉRICO

El método empleado para la solución de la ecuación de Schrödinger 1D fue el de diferencias finitas junto con un análisis de autofunciones y autovectores de por el cual una ecuación diferencial parcial con valores de frontera puede solucionarse de forma rápida, el hecho que nos interesa resolver el problema no temporal facilitó la construcción de la ecuación.

Como primer paso se debe dividir la región en una rejilla (cantidades finitas de secciones o elementos de tamaño regular), generalmente se usan polinomios de un grado fijo para realizar la aproximación los cuales deben seccionarse conjuntamente que con el tratamiento adecuado conduce a un sistema lineal de ecuaciones [2].

Con un análisis parecido al abordado en [3] fue posible llevar (Ec. (3)) a una forma de diferencias finitas, por lo tanto, nuestro problema se convirtió en solucionar la siguiente ecuación:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{h^2} + V_i \psi_{i-1} = E \psi_i$$

, donde i se mueve en todas las rejillas y h es el espaciamiento entre rejillas.

La anterior ecuación puede llevarse a la siguiente forma matricial

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{m} + V_1 & -\frac{\hbar^2}{2m} & & \dots \\ \cdot & \dots & & \\ \cdot & & & \\ \cdot & & & \\ \dots & -\frac{\hbar^2}{2m} & \frac{\hbar^2}{m} + V_N & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \psi_N \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \psi_N \end{pmatrix} \quad (5)$$

De (Ec. (3)) podemos hallar los posibles E y el vector:

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \psi_N \end{pmatrix}$$

con el uso de numpy, en específico con `linalg.eig` y así resolver ambos problemas en un mismo instante.

4. PROGRAMA

Para iniciar se creó una clase llamada `Schrodinger` la cual debe darse el intervalo donde se hallara la función de onda, el potencial que actuara sobre la partícula y su masa, en las siguientes líneas se vera como se construye el hamiltoniano y se halla la función de onda (autovalores) y la energía (autovectores), dicha construcción es se encuentra en el constructor de la clase.

```
self.x=np.linspace(a,b,N)
self.m=m
h = self.x[1]-self.x[0]
#De la ecuación Construcción del hamiltoniano en #forma matricial
obtenido de la diferencia finita de la ecuación de Schrödinger 1 -D
```

```
T = np.zeros((N-2)**2).reshape(N-2,N-2)
self.V_z=V(self.x)
```

```
for i in range(N-2):
    for j in range(N-2):
        if i==j:
            T[i,j]= -2
        elif np.abs(i-j)==1:
            T[i,j]=1
```

```
self.T = T
V_i = np.zeros((N-2)**2).reshape(N-2,N-2)
```

```
for i in range(N-2):
    for j in range(N-2):
        if i==j:
            V_i[i,j]= V(self.x[i])
self.V_i = V_i
self.H = -0.5*(hbar)**2 / (self.m)*v_c**(2) *self.T/(h**2) + self.V_i
```

#Se usa la librería linalg para no hallar las autofunciones y autovectores de H

```
self.val,self.vec=np.linalg.eig(self.H)
self.energia=self.val[np.argsort(self.val)][0:4]
#no se asegura que las autofunciones y los autovalores hallados se encuentren en orden
```

Luego de tener la energía y la función de onda se creó un método el cual grafica la función de onda y su módulo al cuadrado contra la posición y para tener el intervalo correcto se añadió un cero al inicio y al final del arreglo de autofunciones para poder tener el tamaño correcto y que en los extremos ($-\infty$ y ∞) se anule la función de onda.

5. SISTEMAS PARTICULARES

Aplicaremos el algoritmo a tres potenciales fundamentales e importantes en física, estos son: el pozo finito de potencial, el pozo infinito de potencial y el oscilador armónico; cada uno de estos, modelando un sistema físico. Los potenciales están dados por:

Pozo finito:

$$V(z) = \begin{cases} 0 & |z| \leq a/2 \\ V_0 & |z| > a/2 \end{cases} \quad (6)$$

Pozo infinito:

$$V(z) = \begin{cases} 0 & |z| \leq a/2 \\ \infty & |z| > a/2 \end{cases} \quad (7)$$

Oscilador armónico:

$$V(z) = \frac{1}{2}m\omega^2 z^2 \quad (8)$$

a. Electrón en un pozo finito

Vamos a modelar este sistema con un pozo finito de potencial, ecuación (7). Los parametros para este sistema son

Parametros		
Masa [MeV/c ²]	V_0 [eV]	a (ancho del pozo) [m]
0.51099	100	2×10^{-10}

Table 1. Parametros para el modelo del electrón confinado

Los autovalores de energía obtenidos numericamente, comparados con el potencial se pueden ver en la siguiente imagen

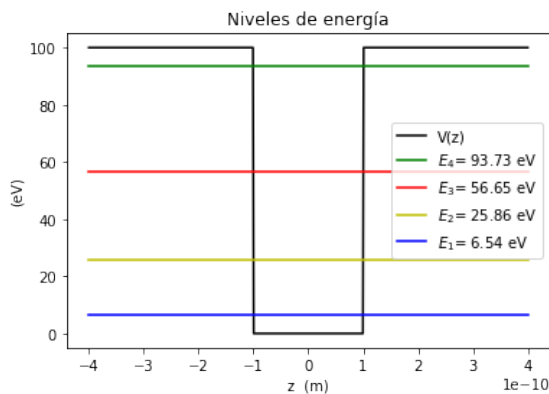


Fig. 1. Niveles de Energía del electrón confinado en un pozo finito de potencial

Observe que el estado fundamental es $E_1 = 6.54$ eV, que se aproxima bien a su valor teórico: 6.58 eV (ver [4])

Grafiquemos las autofunciones (funciones de onda) obtenidas y su modulo cuadrado asociadas a cada autovalor de energía.

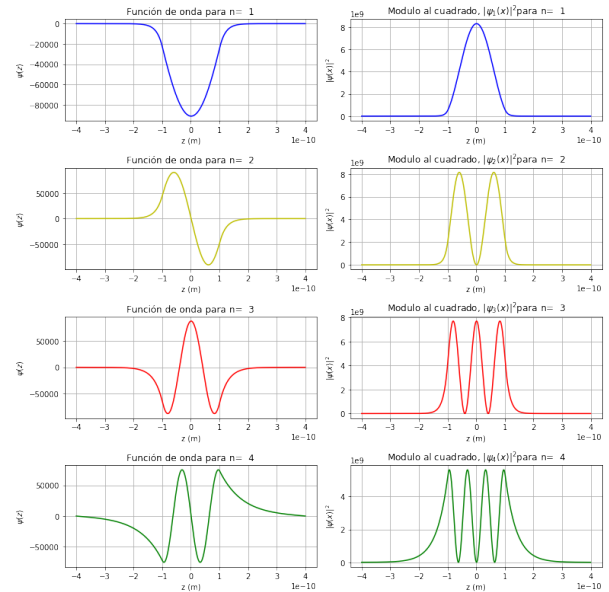


Fig. 2. Funciones de onda normalizadas y su modulo cuadrado

Observe que para las regiones fuera del pozo a medida que nos alejamos del pozo, las funciones de onda decaen a 0 como una exponencial tal como en la teoría, además se ve que hay dos funciones pares y dos impares, esta paridad es debida a la simetría del pozo respecto al origen. Cabe mencionar que este sistema con el valor que se escogio para $V_0 = 100$ eV, solo posee 4 autovalores de energía, veremos a continuación el pozo infinito, el cual posee infinitos autovalores de energía de los cuales vamos a ver los cuatro primeros

b. Electrón confinado

Para modelar el confinamiento del electrón, tomaremos los mismos parametros del problema anterior a excepción de V_0 el cual tiene que ser muy grande para las escalas del sistema, tomaremos entonces $V_0 = 1200$ eV. Usemos el algoritmo para hallar sus autovalores y autofunciones.

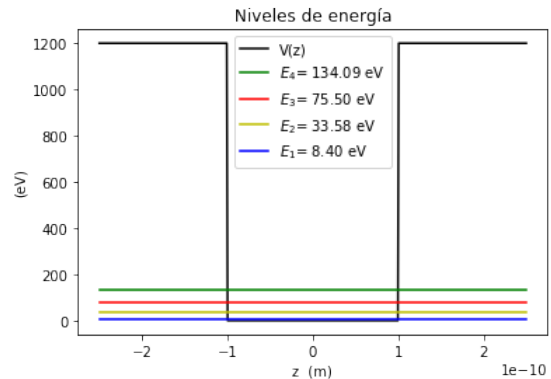


Fig. 3. Niveles de energía

Los valores hallados para la energía satisfacen con una muy buena precisión la razón entre el n -ésimo autovalor y el estado fundamental, E_1 , tal como en la teoría; Dicha razón esta dada por:

$$\frac{E_n}{E_1} = 2n + 1$$

Esta expresión es dada por la teoría. veamos ahora las funciones de onda.

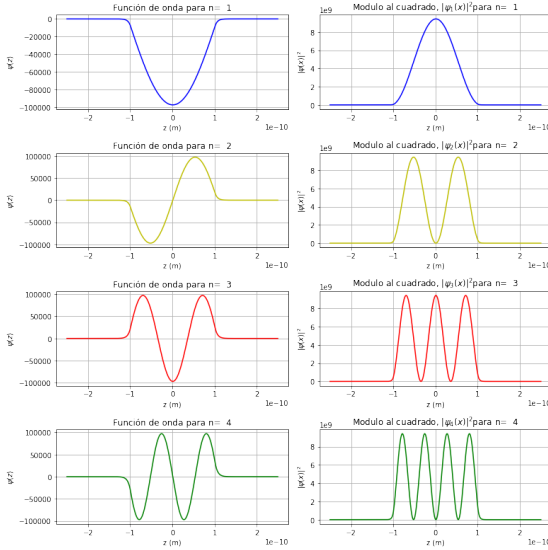


Fig. 4. funciones de onda y densidades de probabilidad

Observe que a diferencia del sistema anterior las autofunciones son cero en las regiones fuera del pozo, los que es consistente con lo mencionado sobre las propiedades de la función de onda en la sección II.

c. Átomo muonico pesado.

La interacción de un muon con un núcleo atómico mediante a un campo Coulombiano puede formar un estado ligado con el núcleo. La constitución de este sistema se llama átomo muónico. Para este sistema vamos a ver la interacción de un muon con un núcleo de plomo, cuyo número atómico es: $Z = 82$, y con radio no despreciable del orden de $8.5 \times 10^{-15} m$. (ver [5])

Este sistema es un poco mas complicado debido a que el radio de Bohr del muon es del mismo orden que el radio de plomo, por lo que ya no podemos considerar el núcleo como puntual, tal como en el átomo de hidrogeno. Para modelar entonces este problema tenemos que para distancias menores al radio del núcleo de plomo la interacción muon-núcleo va estar dada por el potencial de un oscilador armónico [Ec (7)] y para distancias mayores al radio del núcleo con un potencial de Coulomb $V \sim 1/r$.

Vamos a considerar acá solo la interacción para distancias menores a el radio del núcleo. es decir la que esta dada por un potencial armónico. La frecuencia angular del sistema depende del radio del núcleo, este ultimo asumimos que es una esfera con una carga distribuida uniformemente. La masa es del muon es 207 veces la masa del electrón, que corresponde al valor que hay en la primera columna de la tabla anterior, el dominio en el que es valido el potencial que vamos a estudiar tiene asociado

Parametros		
Masa [MeV / c^2]	ω [rad/seg]	dominio [10^{-15} m]
105.77	1.3×10^{22}	$[-8.5, 8.5]$

Table 2. Parametros del sistema

una rango de energía, para los autovalores, entre 0 y $7.2 Mev$. Calculemos los autovalores y autofunciones en para este dominio.

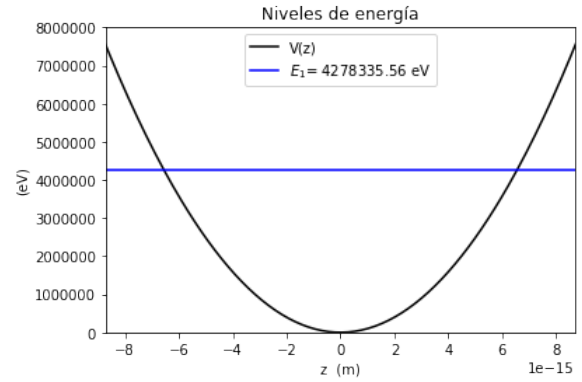


Fig. 5. Niveles de energía

Encontramos un solo autovalor ($E_1 = 4.2 MeV$) en este dominio, ya que para energías mayores a $7.1 Mev$ debemos obtener los autovalores con un potencial de Coulomb. decimos que E_1 es el estado fundamental del la interacción muon-núcleo. La función de onda y la densidad de probabilidad del estado fundamental son:

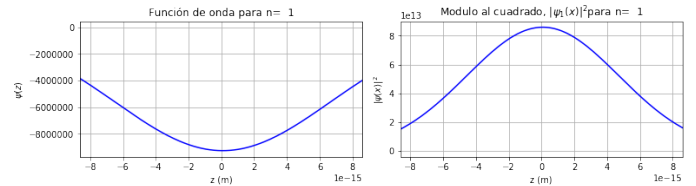


Fig. 6. función de onda Normalizada y densidad de probabilidad del estado fundamental

se observa que esta función densidad de probabilidad es una función gaussiana tal como el estado fundamental del oscilador armonico

6. CONCLUSIONES

El algoritmo funciona y coincide con los resultados obtenidos analíticamente para cualquier potencial, dicho potencial, como mostramos en la sección anterior; el algoritmo es por tanto un método para solucionar la ecuación de schrödinger unidimensional, es decir basta con evaluar un potencial para obtener las autofunciones y los autovalores de energía, dicho potencial se trabaja en unidades de [eV], pero con un pequeño cambio se puede trabajar en las unidades que se deseen.

APÉNDICE: EVOLUCIÓN TEMPORAL DE UNA SUPERPOSICIÓN DE ESTADOS ESTACIONARIOS.

Cualquier estado se puede describir como la combinación lineal de las autofunciones del sistema, así por ejemplo en el ejemplo V-a cualquier estado dentro del pozo finito puede describirse como una combinación lineal de las cuatro autofunciones halladas.

La evolución temporal de los estados estacionarios está dado por la ecuación (2).

Veamos la evolución temporal de la superposición de estados estacionarios del sistema estudiado en V-a (electrón en un pozo finito).

supongamos que en un instante $t = 0$ se prepara el sistema de tal forma que su estado está descrito por la siguiente función de onda:

$$\phi(z, 0) = c_1\psi_1(z) + c_2\psi_2(z) + c_3\psi_3(z) + c_4\psi_4(z)$$

donde los $\psi_n(z)$ son las autofunciones normalizadas del sistema. La evolución temporal $\phi(z, t)$ va a estar dada por (2):

$$\phi(z, t) = c_1\Psi_1(z, t) + c_2\Psi_2(z, t) + c_3\Psi_3(z, t) + c_4\Psi_4(z, t)$$

es decir:

$$\phi(z, t) = \sum_{n=1}^4 c_n \psi_n(z) e^{-iE_n t/\hbar}$$

Ahora escojamos unos coeficientes c_n de tal forma que $\phi(z, t)$ esté normalizada para todo t . Estos son:

$$c_1 = \frac{3}{\sqrt{30}}, c_2 = \frac{1}{\sqrt{30}}, c_3 = \frac{2}{\sqrt{30}} \text{ y } c_4 = \frac{4}{\sqrt{30}}$$

a continuación se muestran las gráficas (Fig 7) de la parte real de ϕ y la densidad de probabilidad ($|\phi|^2$) asociada a este estado en los tiempos $t = 0, 2, 4, 6$ seg

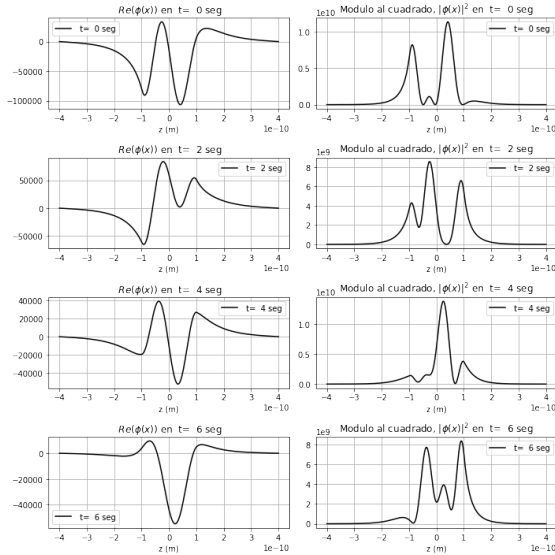


Fig. 7. parte real y modulo cuadrado de ϕ en diferentes instantes de tiempo

Pozo infinito

Tomemos la mismos coeficientes y los mismos tiempos para obtener un estado pero en el sistema, V-b es decir en el pozo infinito de potencial, veamos la función de onda de la superposición y su densidad de probabilidad (FIG 8), y comparemos con el caso anterior.

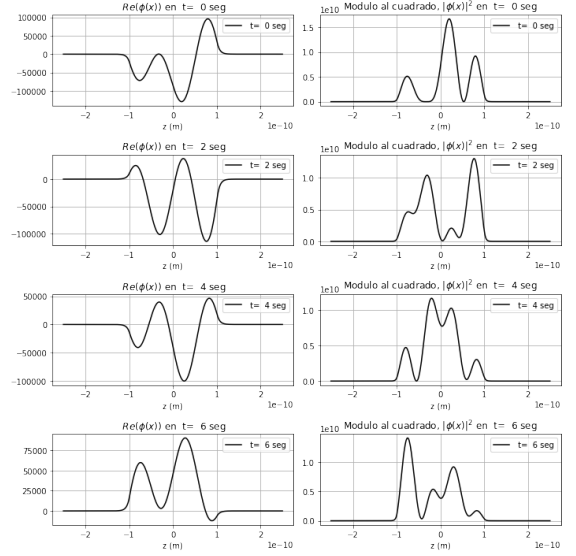


Fig. 8. parte real y modulo cuadrado de ϕ en diferentes instantes de tiempo

tal como los estados estacionarios del pozo infinito, la superposición de estos da una función de onda que también se anula afuera del pozo, a diferencia del la superposición del pozo finito (FIG 7)

REFERENCES

1. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, "Mecánica Cuántica no-Relativista," (1983).
2. Richard L. Burden, "Análisis Numérico," Séptima ed.
3. D. Paul L, "A first course in computational," (1993).
4. S. Raymond A, M. Clement J, and M. Curt A, "Modern physics," (2005), tercera ed.
5. C. Tannoudji, "Quantum mechanics," in *Selected Papers of Lev P. Gor'kov*, .