

Número de puntos	E_{1s}	E_{2s}	E_{3s}	E_{4s}
1000	-0.499858	-0.083920	0.055539	0.181750
3000	-0.499924	-0.084062	0.055531	0.181654
5000	-0.499930	-0.084088	0.055529	0.181652
10000	-0.499932	-0.084108	0.055528	0.181651
30000	-0.499933	-0.084120	0.055528	0.181651
50000	-0.499933	-0.084131	0.055530	0.181626
100000	-0.499933	-0.084129	0.055532	0.181628
500000	-0.499933	-0.084126	0.055528	0.181627
1000000	-0.499933	-0.084127	0.055528	0.181626

Cuadro 1: Valores obtenidos para E usando distintas mallas.

infinito práctico resulta demasiado pequeño y sería necesario utilizar uno mayor. Otra posible consecuencia de que el infinito práctico sea demasiado pequeño para estos orbitales es la ubicación del primer máximo del 4s respecto al 3s, estando por encima de este último cuando se espera que se encuentre por debajo. Usando un infinito práctico de 20, y manteniendo el valor de h , disminuye la diferencia entre el 3s y 4s, como puede apreciarse en la Figura 2. Dados estos resultados, excepto donde se señale, usaremos el valor de 20 como infinito práctico y valor de h utilizado en dicho cálculo, correspondiente a 666667 puntos en la malla.

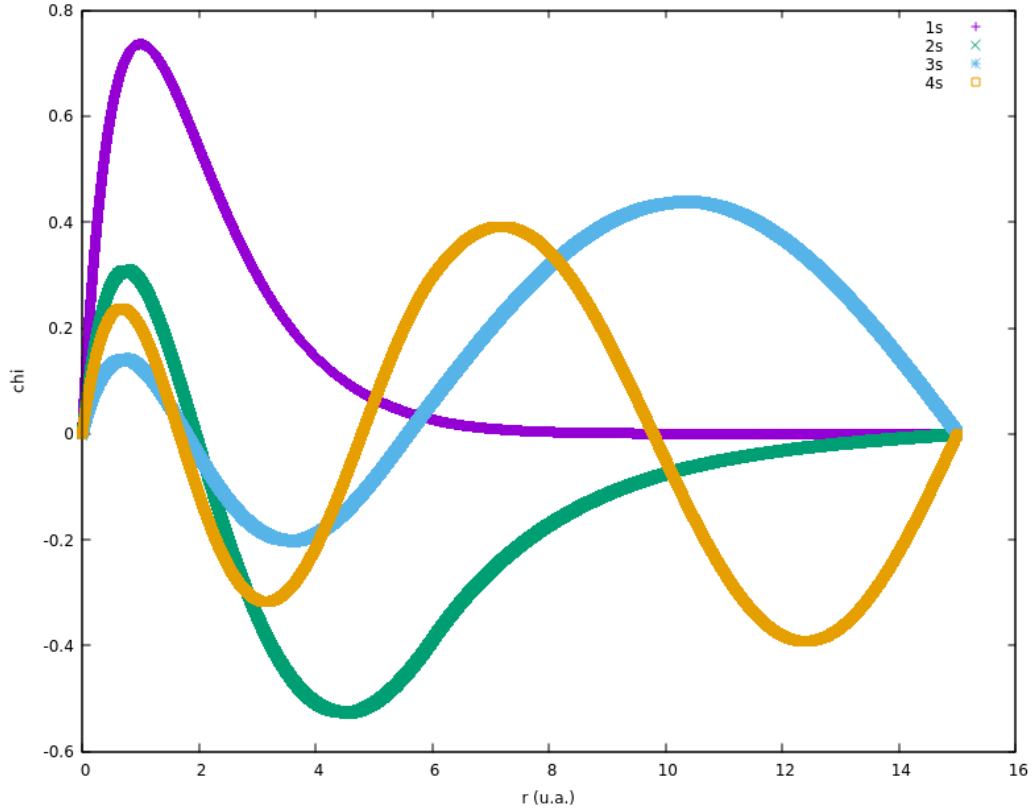


Figura 1: χ de los primeros 4 orbitales s del H, con $r_c = 6,0$ y un limite superior de 15.

En la Figura 3 se muestran las χ obtenidas para los estados 2p, 3p y 4p del H; al igual que en el caso de los orbitales s, observamos que el 3p y 4p llegan de forma brusca al cero, y que el primer máximo del 4p es mayor al del 3p. Esta diferencia es mayor a la observada con el 3s y 4s, lo cual es esperable ya que los orbitales p están más distribuidos que los s y requerirán

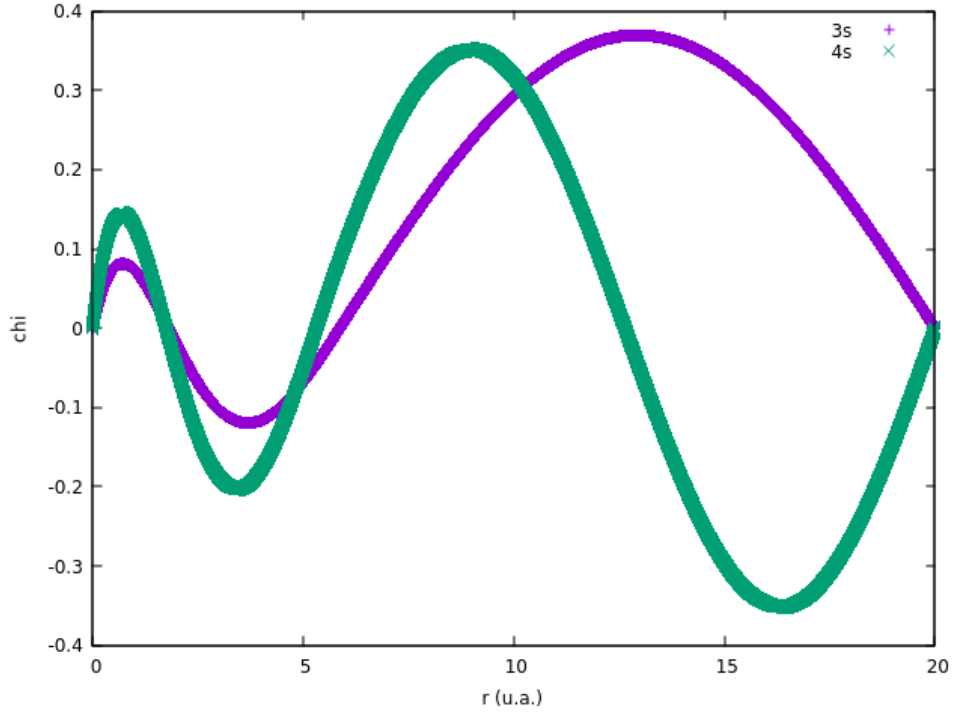


Figura 2: χ de los orbitales 3s y 4s del H, con $r_c = 6,0$ y un limite superior de 20.

que se considere un infinito práctico mayor. En la Figura 5 se comparan las χ de los orbitales 1s y 2p, donde puede apreciarse que tienen una forma similar, pero con el máximo desplazado. Adicionalmente, en la Figura se muestran las χ obtenidas para los orbitales 3d y 4d utilizando 30000 puntos en la malla, dado que al usar el valor previamente usado el programa no arroja resultados. En este caso se observa el número adecuado de nodos y el máximo del 4d por debajo del máximo del 3d, pero se presenta una distorsión en la forma del 3d cerca del radio de corte.

En el caso del átomo de H libre se espera que las energías de los orbitales 2s y 2p sean iguales, dado que esta solo depende de n (ecuación 17). Esto no es cierto cuando el átomo de H se encuentra confinado: en la Tabla 2 se comparan los valores de energía de orbitales con el mismo valor de n , utilizando valores de radio de corte de 2.0, 6.0 y 12.0. En ambas comparaciones es notorio como, conforme el radio de corte es menor, la energía asociada al orbital aumenta hasta ser incluso mayor a cero. Además, las energías entre los orbitales con un mismo valor de n dejan de ser iguales, pero comienzan a ser más semejantes conforme aumentamos el radio de corte y nos acercamos al caso de la partícula libre. En la Figura 6 se muestra como cambia el comportamiento de χ para el orbital 2s conforme aumentamos el radio de corte.

r_c	E_{2s}	E_{2p}	E_{3s}	E_{3p}
2.0	0.014925	0.024954	0.059390	0.072073
6.0	-0.084165	-0.102830	0.024715	0.028305
12.0	-0.124201	-0.124625	-0.033457	-0.025762

Cuadro 2: Valores obtenidos de E en Hartrees para orbitales con n igual. Para r_c igual a 2.0 y 6.0 los resultados se obtuvieron con 666667 puntos en la malla, mientras que para $r_c = 12,0$ se usaron 500000 puntos. En ambos casos se uso un infinito práctico de 20.

Finalmente, de las distintas χ obtenidas calculamos la $R(r)$ asociada, dividiendo los resultados entre r . En las Figuras 7, 8 y 9 se muestran las funciones radiales de orbitales con el mismo valor de n , usando un radio de corte de 6.0. Claramente el comportamiento de dichas

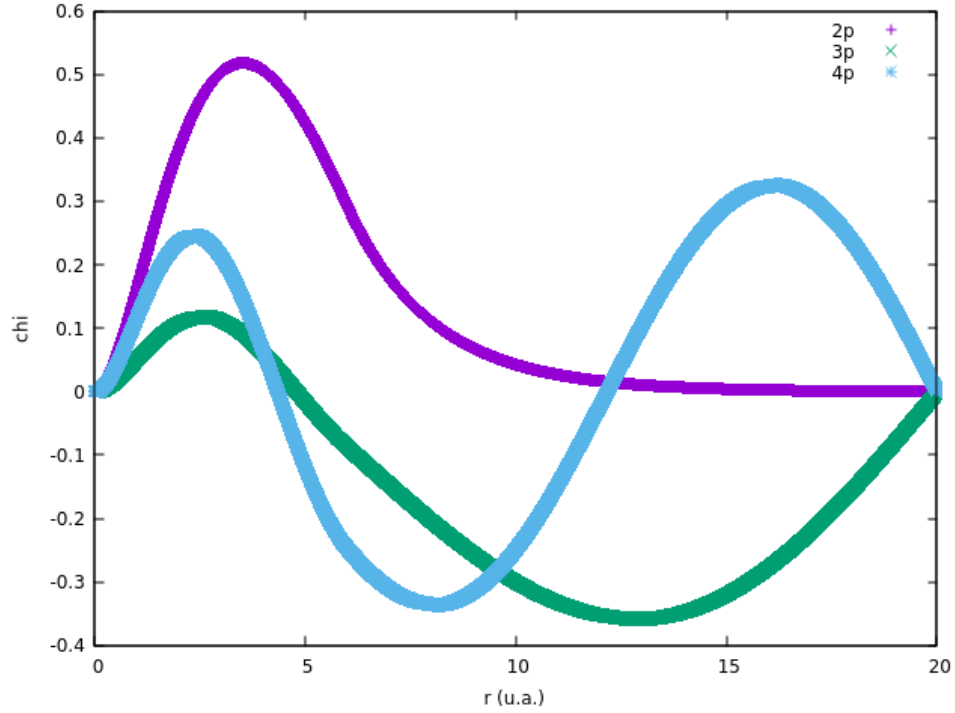


Figura 3: χ de los primeros 3 orbitales p del H, con $r_c = 6,0$ y un limite superior de 20.

funciones concuerda con el que esta reportado en la literatura.

Conclusiones

Mediante el método de Numerov es posible obtener buenos resultados para la parte radial de la función de onda del átomo de hidrógeno, pero resulta muy importante tener cuidado en la elección de los parámetros involucrados en el cálculo, ya que el método depende bastante de una buena elección de h , de la precisión de las variables utilizadas y la elección de un infinito práctico adecuado para el orbital que se desee reproducir.

Con el programa obtenido, fue posible obtener resultados interesantes para radios de corte del potencial variados para diferentes orbitales, con lo cual simulamos algunas situaciones de confinamiento del átomo de H. De estos resultados, es importante rescatar la importancia del uso de valores adecuados del radio de corte según deseemos observar situaciones de gran o nulo confinamiento para un tipo de orbital dado, ya que los resultados pueden corresponder para orbitales de bajos n y l al caso libre, mientras que para valores distintos de estos números cuánticos los efectos de confinamiento ya resultan importantes.

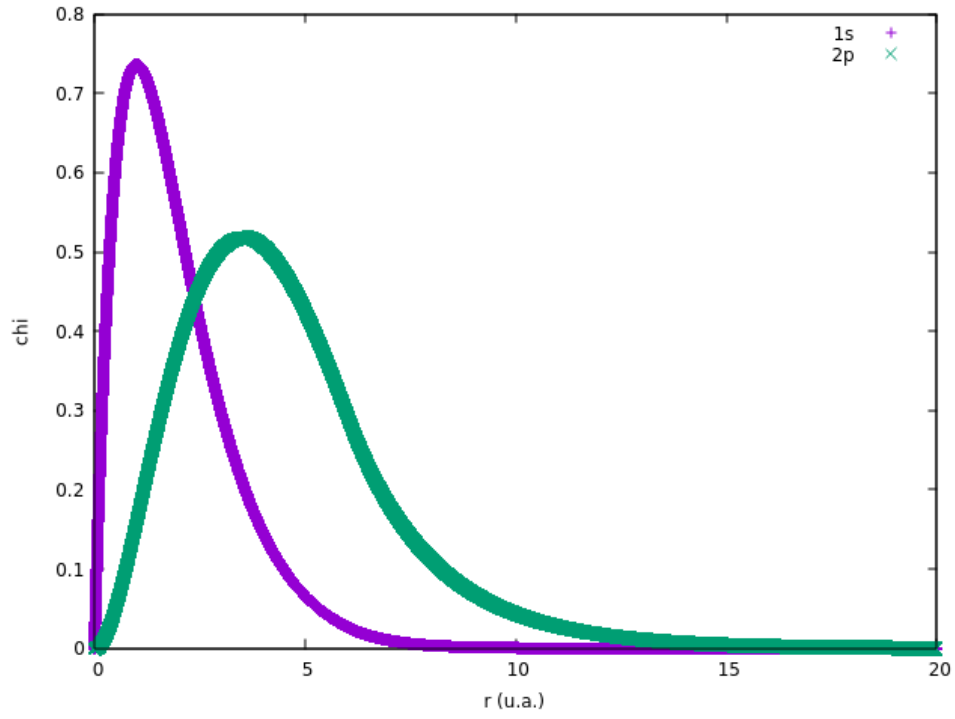


Figura 4: χ de los orbitales 1s y 2p del H, con $r_c = 6,0$ y un limite superior de 20.

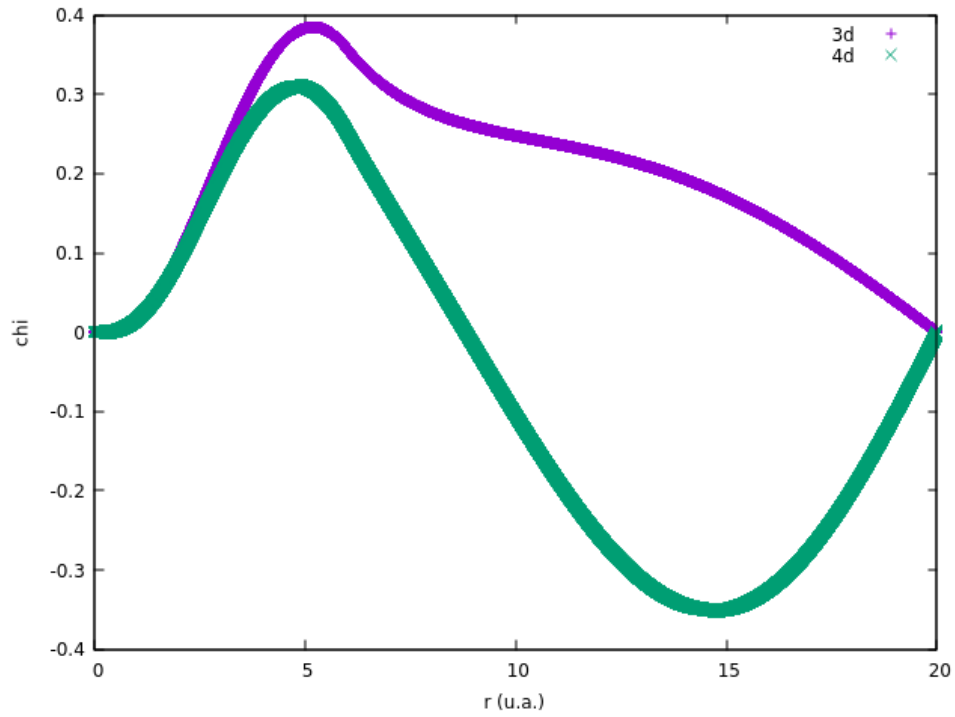


Figura 5: χ de los primeros 2 orbitales d del H, con $r_c = 6,0$ y un limite superior de 20.

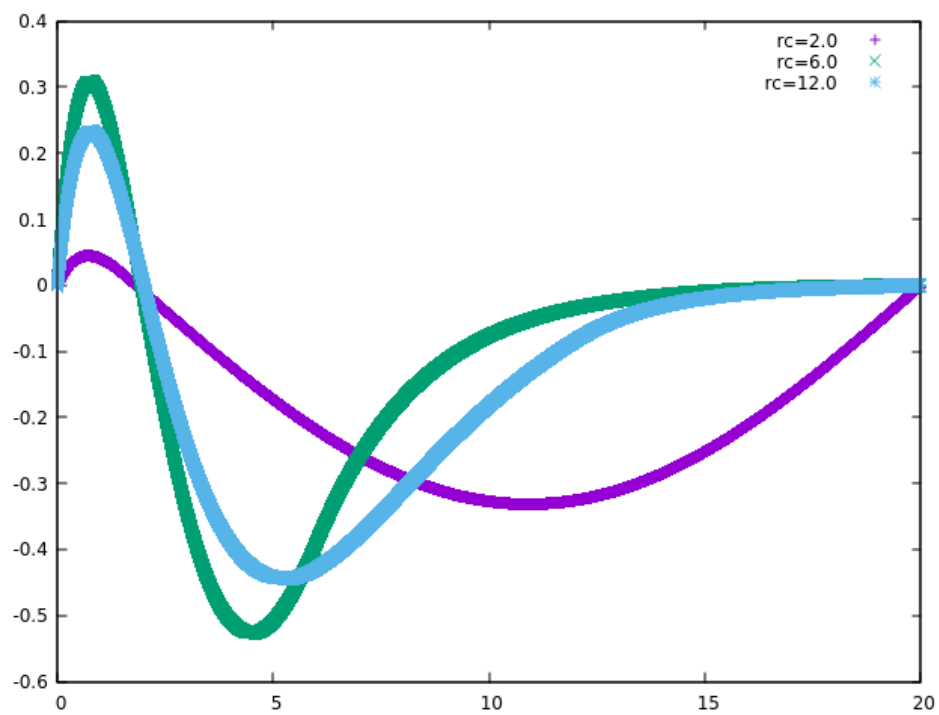


Figura 6: χ del orbital 2s del H, con diferentes valores de r_c como se indica en la gráfica.

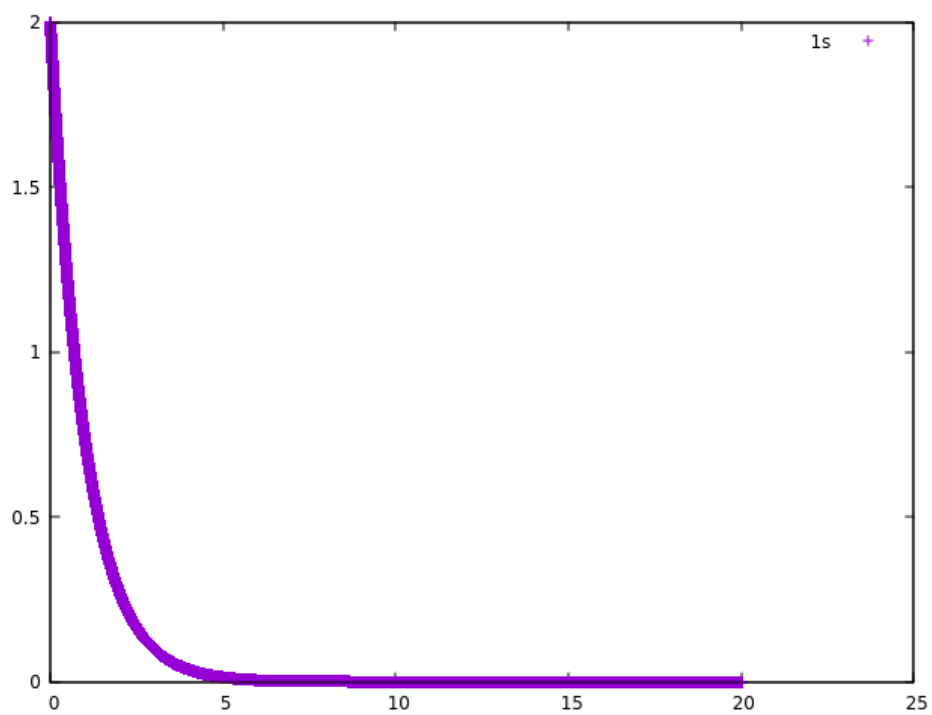


Figura 7: $R(r)$ del orbital 1s del H, con $r_c = 6,0$.

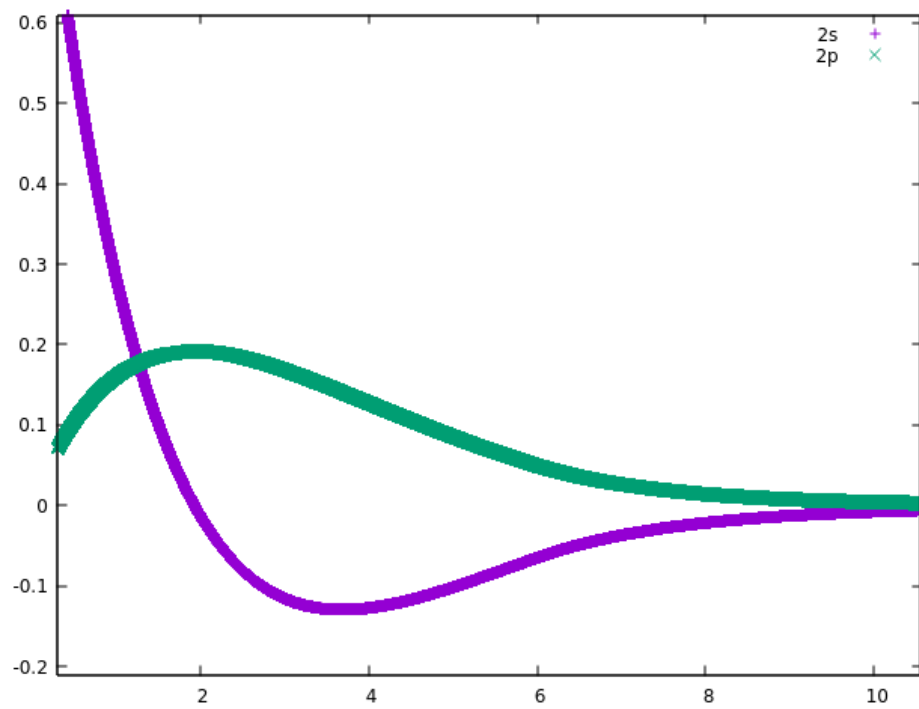


Figura 8: $R(r)$ del orbital 2s y 2p del H, con $r_c = 6,0$.

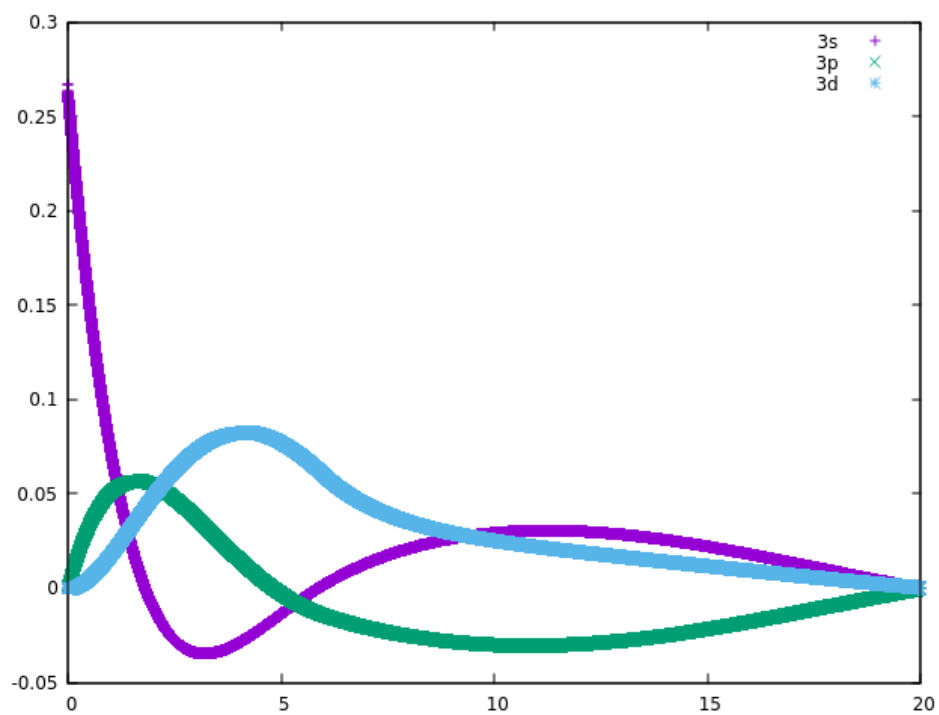


Figura 9: $R(r)$ del orbital 3s, 3p y 3d del H, con $r_c = 6,0$.