

ANÁLISIS DE SISTEMAS CUÁNTICOS

Profesor: Julio César Gutiérrez Vega

Profesor: Hugo Alarcón Opazo

Estados atrapados y comportamiento crítico del potencial de Yukawa

Jorge Daniel de la Torre Gallegos, A01635519

Marcelo Alcaraz Uribe, A01641700

Alejandro Daniel Flores Camacho, A00836368

Javiera Rojas Martínez, 20227906 - 7

Catalina Montecino Castillo, 202187019-9

Juan Carlos Zambrano, 26093692-1

Viernes 22 de noviembre de 2024

1. Introducción

En mecánica cuántica, una de las fórmulas mas importantes que existe es la ecuación de Schrödinger, la cual viene dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + V_{eff}(r)u(r) = Eu(r), \quad (1)$$

donde $u(r)$ es el componente radial de la función de onda y $V_{eff}(r)$ es el potencial efectivo

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}, \quad (2)$$

y l es el número cuántico asociado a la componente z del momento angular, el cual cumple con la relación $L^2 = l(l+1)\hbar^2$.

El potencial de Yukawa describe cómo interactúan las partículas dentro del núcleo atómico y su característica mas relevante es que decae exponencialmente con la distancia, lo que significa que la interacción entre partículas disminuye a medida que se alejan y está descrito por:

$$V(r) = -\lambda \frac{\exp[-\alpha r]}{r}, \quad (3)$$

donde λ , α son constantes y $V(r)$ es el potencial. Este trabajo se centra en analizar los estados ligados y el comportamiento crítico del potencial de Yukawa, aplicando 2 métodos numéricos: el algoritmo de Numerov y el método Runge-Kutta 4to orden.

2. Método de Numerov

El método de Numerov se utiliza para resolver las ecuaciones diferenciales de la forma:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = f(x, y), \quad (4)$$

Para nuestro caso, debemos considerar la ecuación diferencial de Schrodinger donde tendremos una ecuación radial en términos de $q(r)$:

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + q(r)u(r) = 0, \quad (5)$$

donde $q(r) = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_{eff}(r))$. Diferenciando se obtiene la relación

$$c_{n+1}u_{n+1} + c_{n-1}u_{n-1} = c_n u_n, \quad (6)$$

y los coeficientes son

$$\begin{aligned}c_{n+1} &= 1 + \frac{h^2}{12}q_{n+1}, \\c_n &= 2 - \frac{5h^2}{6}q_n, \\c_{n-1} &= 1 + \frac{h^2}{12}q_{n-1},\end{aligned}$$

con h como el paso de integración.

2.1. Código

Para determinar la cantidad de estados atrapados y sus funciones de onda es necesario calcular primero los valores propios de la energía para cada configuración. Para ello se emplea un método de disparo que aprovecha la naturaleza oscilatoria de la función de onda y las condiciones de frontera. El método consiste en resolver la ecuación diferencial numéricamente y encontrar los valores de E que satisfagan las siguientes condiciones:

1. El estado asociado a la energía E_n , tiene exactamente n nodos.
2. $u_n(0) = 0$.

El algoritmo de Numerov presenta inestabilidad en potenciales singulares cuando se integra hacia adelante, por esto la función de onda $u(r)$ se inicia con las condiciones de frontera apropiadas en el infinito y para obtener la solución, se hace la integración en reversa usando la relación de recurrencia de Numerov (6).

Al tener una singularidad en el origen, se vuelve imposible aplicar la ecuación (6) para encontrar el valor de $u_0 = u(0)$, ya que este involucra u_0'' que depende de $V_{eff}(0)$, el cual es infinito. Para resolver este problema se utilizaron aproximaciones para el valor de u_0 que evitan el uso de u_0'' en su cálculo y fueron derivadas por Buendía y Guardiola [2] para $l = 0$ y por Ixaru [3] para $l > 0$.

3. Runge-Kutta 4to orden

Este método numérico ampliamente conocido y utilizado para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs) de primer y segundo orden, con una estructura más general

$$\frac{d^2y}{dx^2} + \frac{dy}{dx} = f(x, y),$$

en este caso se quiere resolver la ecuación diferencial

$$\frac{d^2u(r)}{dr^2} = -q(r)u(r),$$

pero este método requiere de la primera derivada para poder calcular los valores de la función, por lo que se hace un cambio de variable

$$z(r) = \frac{du(r)}{dr} = f(r),$$

$$\frac{dz(r)}{dr} = -q(r)u(r) = g(r, u).$$

Al igual que el algoritmo de Numerov, este método también tiene que ser integrando en reversa. Con esto se obtiene

$$u_{i-1} = u_i - \frac{h}{6}(A_1 + 2A_2 + 2A_3 + A_4)$$

$$z_{i-1} = z_i - \frac{h}{6}(B_1 + 2B_2 + 2B_3 + B_4)$$

con

$$\begin{aligned} A_1 &= f(r_i, u_i, z_i) & B_1 &= g(r_i, u_i, z_i) \\ A_2 &= f\left(r_i - \frac{h}{2}, u_i - \frac{h}{2}A_1, z_i - \frac{h}{2}B_1\right) & B_2 &= g\left(r_i - \frac{h}{2}, u_i - \frac{h}{2}A_1, z_i - \frac{h}{2}B_1\right) \\ A_3 &= f\left(r_i - \frac{h}{2}, u_i - \frac{h}{2}A_2, z_i - \frac{h}{2}B_2\right) & B_3 &= g\left(r_i - \frac{h}{2}, u_i - \frac{h}{2}A_2, z_i - \frac{h}{2}B_2\right) \\ A_4 &= f(r_i - h, u_i - hA_3, z_i - hB_3) & B_4 &= g(r_i - h, u_i - hA_3, z_i - hB_3) \end{aligned}$$

El método de Numerov y de Runge kutta se diferencian en que Runge Kutta es mas general y se usa para integrar EDOs, incluyendo la ecuación de Schrödinger. En cambio, el método de Numerov está diseñado para ecuaciones de segundo orden, como las cuánticas, ofreciendo mayor precisión y eficiencia en esos casos.

3.1. Código

Para determinar los estados atrapados y sus funciones de onda, se requiere calcular los valores propios de la energía correspondientes a cada configuración. Al igual que con el método de disparo, se resuelve la ecuación diferencial numéricamente para encontrar los valores de la energía que satisfacen las condiciones de frontera.

Este método se caracteriza por usar una combinación ponderada de evaluaciones de la derivada en varios puntos dentro de cada paso de integración. La precisión de este método mejora conforme se incrementa el número de pasos de integración.

Para resolver el problema de los estados atrapados, se implementa el algoritmo de Runge-Kutta de 4to orden para avanzar en la solución desde una condición inicial, utilizando las

condiciones de frontera en el infinito. En el caso de una singularidad en el origen, se aplican técnicas de regularización para evitar problemas numéricos al tratar con el comportamiento divergente de las funciones en esa región [4]. Esta aproximación permite obtener los valores propios de energía y las funciones de onda sin la necesidad de recurrir a métodos de integración hacia atrás, como en el caso del método de Numerov.

4. Estados atrapados

Se obtuvieron las Fig 2 ,3 y 4 que muestran la función de onda reducida de los primeros tres estados ligados en $l = 0$, $\lambda = 1$ y $\alpha = 0.1$.

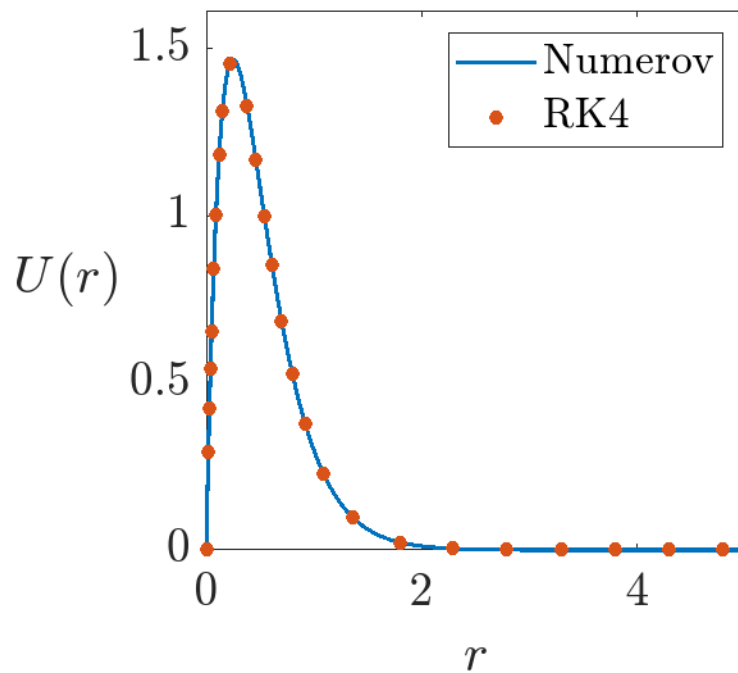


Figura 1: Función de onda reducida para el estado fundamental en $l = 0$, $\lambda = 1$ y $\alpha = 0.1$

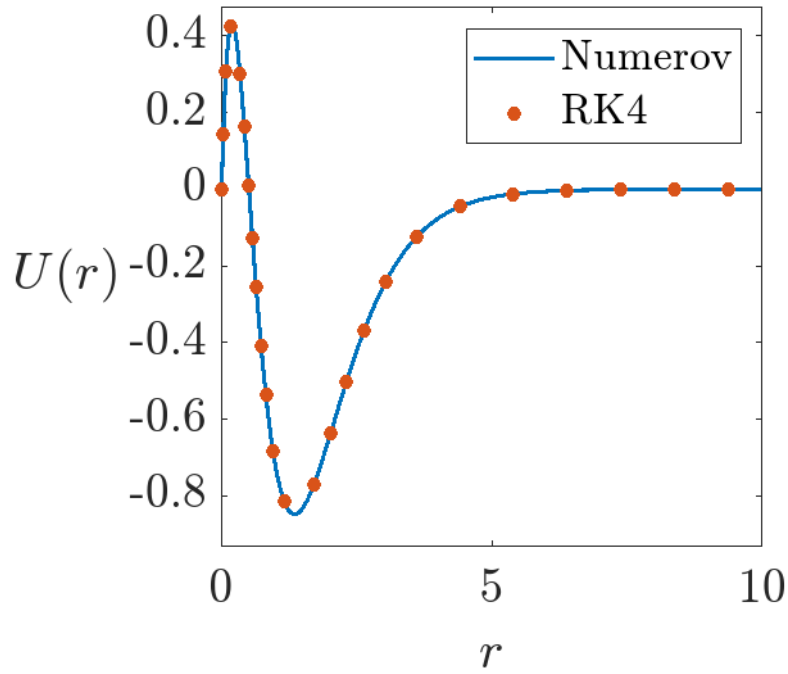


Figura 2: La misma que Fig 1 pero para el primer estado excitado.

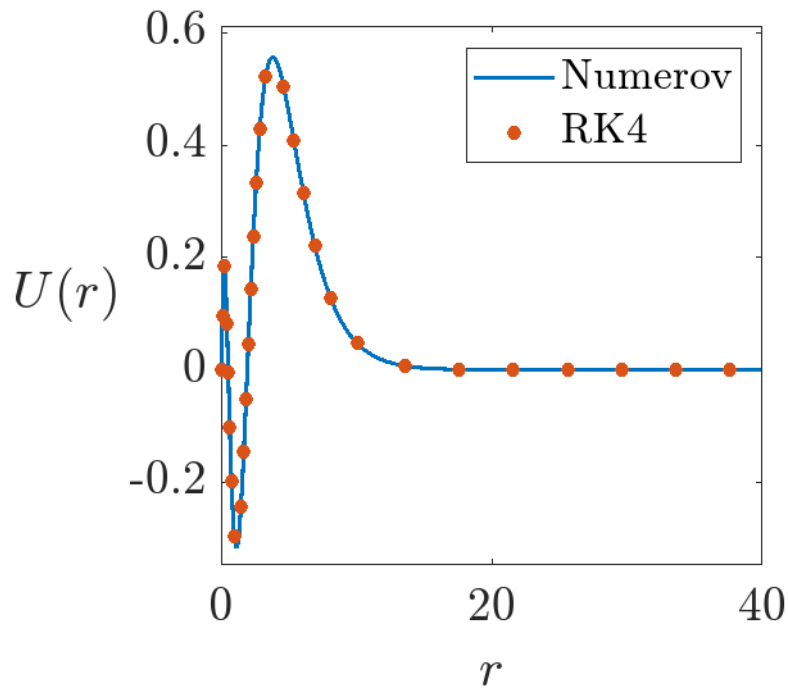


Figura 3: La misma que Fig 1 pero para el segundo estado excitado.

En la Fig. 1 se observa cómo la función de onda se comporta para el estado de energía más bajo, caracterizado por no tener nodos. Por otro lado, en la Fig. 2, la función de onda

presenta un nodo, lo que indica un estado de energía mayor que el fundamental. Finalmente, la Fig. 3 corresponde al segundo estado excitado, donde la función de onda tiene dos nodos. Esto refleja un nivel de energía superior al primer estado excitado y un comportamiento más oscilatorio de la función de onda.

Por otro lado a modo de comparación con el paper 1 se obtuvo la Tabla 1 donde se enumeran algunos datos espectrales para $l = 0$, $\lambda = 1$ y $\alpha = 0.1, 0.2, 0.3$ y 0.4 .

Cuadro 1: Valores de energía obtenidos para distintos valores de α y su respectivo número cuántico con $l = 0$, $\lambda = 1$

| α | Número cuántico n | E |
|----------|---------------------|---------|
| 0.1 | 1 | -0.4070 |
| | 2 | -0.0499 |
| | 3 | -0.0032 |
| 0.2 | 1 | -0.3268 |
| | 2 | -0.0121 |
| 0.3 | 1 | -0.2576 |
| 0.4 | 1 | -0.1984 |

De la Tabla 1 podemos notar que a medida que α aumenta, el número de estados ligados (con energía negativa) disminuye. Esto sugiere que una mayor α , que representa una interacción más corta en el potencial de Yukawa, limita la cantidad de estados ligados. También Para cada valor de α , el estado fundamental (con $n = 1$) tiene la energía más baja. A medida que el número cuántico n aumenta, la energía se vuelve menos negativa, lo que indica niveles de energía más altos y menos ligados.

El Cuadro 2 detalla la cantidad de estados ligados para $l = 0$ y diferentes valores de λ y α .

Cuadro 2: Numero de estados ligados para $l = 0$ y distintos valores de λ y α

| α | $\lambda = 1$ | $\lambda = 2$ | $\lambda = 3$ | $\lambda = 4$ | $\lambda = 5$ |
|------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|
| 0 | ∞ | ∞ | ∞ | ∞ | ∞ |
| 0.1 | 3 | 5 | 6 | 7 | 7 |
| 0.2 | 2 | 3 | 4 | 5 | 5 |
| 0.3 | 2 | 2 | 3 | 4 | 4 |
| 0.4 | 1 | 2 | 3 | 3 | 3 |
| 0.5 | 1 | 2 | 2 | 3 | 3 |
| 0.6 | 1 | 2 | 2 | 2 | 3 |
| [0.7, 0.9] | 1 | 1 | 2 | 2 | 2 |
| [1.0, 1.1] | 1 | 1 | 1 | 2 | 2 |
| 1.2 | 0 | 1 | 1 | 2 | 2 |
| [1.3, 1.5] | 0 | 1 | 1 | 1 | 2 |
| [1.6, 2.3] | 0 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| [2.4, 3.5] | 0 | 0 | 1 | 1 | 1 |
| [3.6, 4.7] | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 |
| [4.8, 5.9] | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| 6.0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |

Del Cuadro 2 observamos que, al aumentar el valor de α , la interacción se vuelve más corta, lo cual reduce el número de estados ligados. Para cada valor de λ , el número de estados ligados disminuye a medida que incrementa α . Esto indica que una interacción más corta (mayor α) genera menos estados de energía negativa (estados ligados).

Al comparar el Cuadro 2 con la Tabla 2 del artículo 1, se observaron discrepancias. Por ejemplo, en el intervalo $[4.8, 5.8]$ para $\lambda = 4$, el número de estados ligados en nuestros datos se reduce a cero, lo cual no coincide con lo mostrado en la Tabla 2 del artículo, pero sí con el valor crítico de α reportado en la Tabla 3 del mismo artículo. Además, para $\alpha = 5.9$, nuestros datos muestran cero estados ligados, mientras que el artículo reporta un estado ligado en su Tabla 2 y un estado crítico en $\alpha = 5.95$ en la Tabla 3. Estas discrepancias podrían deberse a diferencias en los métodos de aproximación empleados. Sin embargo, dado que el artículo no especifica los detalles de dichas aproximaciones, no es posible determinar con certeza cuál de los valores es más preciso.

Como se mencionó anteriormente, a medida que aumenta, la interacción se vuelve más corta, lo que reduce la capacidad del potencial para confinar una partícula. El valor de α para el cual el potencial pierde la capacidad de formar estados ligados se denomina alfa crítico (α_c). Este parámetro establece un umbral a partir del cual no se pueden formar estados

ligados, sin importar el valor de λ , el parámetro de acoplamiento. En esencia, define el límite de la "fuerza" del potencial para mantener una partícula confinada en un estado de energía negativa.

El valor crítico de α depende de la magnitud de la constante de acoplamiento, λ , y se observa que a medida que se aproxima a α_c , el número de estados ligados disminuye progresivamente (Cuadro 2). En particular, cuando $\alpha=\alpha_c$, desaparecen todos los estados ligados, ya que la interacción atractiva decae lo suficiente como para no poder atrapar partículas. Los valores de obtenidos para distintos valores de λ se presentan a continuación en el Cuadro 3.

Cuadro 3: α critico para distintos valores de λ

| λ | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
|------------|--------|--------|--------|--------|--------|
| α_c | 1.1905 | 2.3812 | 3.5718 | 4.7624 | 5.9530 |

La relación entre α_c y λ es compleja y está influenciada por el número cuántico del momento angular, l . A medida que l aumenta, se incrementa la repulsión centrífuga, lo que implica que el potencial necesita una atracción más intensa (menor α) para formar estados ligados. El paper de estudio presenta una relación empírica para α_c en función de l , mostrada a continuación:

$$\alpha_c = \lambda \left(A_1 e^{-\frac{l}{B_1}} + A_2 e^{-\frac{l}{B_2}} \right)$$

donde A_1 , B_1 , A_2 y B_2 son constantes obtenidas mediante aproximaciones numéricas. Este modelo muestra que α_c decrece exponencialmente con l , lo que significa que a mayores valores de l , la interacción debe ser aún más atractiva para que el potencial de Yukawa mantenga un estado ligado.

Considerando las distintas configuraciones posibles, se tiene la siguiente relación dependiente de l :

$$k_l = \frac{\alpha_c(l)}{\lambda}$$

Así, para distintos valores de l se obtuvieron los resultados presentados a continuación en el Cuadro 4:

Cuadro 4: Dependencia de k_l en función de l

| l | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
|-------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| k_l | 0.2202 | 0.0913 | 0.0498 | 0.0313 | 0.0215 | 0.0157 | 0.0119 | 0.0094 | 0.0076 | 0.0062 |

Como se puede observar en el Cuadro 4, los valores obtenidos son consistentes con los presentados en la Tabla 4 del paper de estudio. Según la relación de $\alpha_c(l)$, implica que el

valor crítico de α decaerá a medida que aumenta el valor de l , implicando a su vez que el valor de k_l también disminuirá, efecto que se puede observar según los resultados del Cuadro 4. Así, esta relación se puede interpretar considerando que a medida que aumenta el valor de l , el potencial requiere un menor valor de α para alcanzar el umbral en el que desaparecen los estados ligados. Esto se puede entender como una disminución en la capacidad del potencial para retener estados ligados conforme el término dependiente de l se hace más grande, restringiendo la formación de estos estados a interacciones de mayor alcance o más intensas.

5. Conclusión

Este trabajo se enfocó en el análisis de los estados ligados y el comportamiento crítico del potencial de Yukawa mediante los métodos de Numerov y Runge Kutta de cuarto orden. Los resultados obtenidos confirman la dependencia de los estados ligados respecto a los parámetros α y λ del potencial, mostrando cómo una interacción con mayores valores de α disminuye el número de estados ligados. Aunque se encontraron discrepancias en comparación con el artículo de referencia, estas parecen originarse en las diferencias de los métodos de aproximación, aspecto no detallado en la publicación original. Por lo que se crea la necesidad de una revisión más detallada para aclarar las discrepancias de los valores obtenidos.

Referencias

- [1] Li, Y., Luo, X. & Kröger, H. Bound states and critical behavior of the Yukawa potential. *SCI CHINA SER G* 49, 60–71 (2006). (<https://doi.org/10.1007/s11433-004-0020-5>)
- [2] E. Buendía, R. Guardiola, The numerov method and singular potentials, *Journal of Computational Physics*, Volume 60, Issue 3, 1985, Pages 561-564, ISSN 0021-9991, [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(85\)90038-5](https://doi.org/10.1016/0021-9991(85)90038-5). (<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999185900385>)
- [3] L. Gr. Ixaru, The Numerov method and singular potentials, *Journal of Computational Physics*, Volume 72, Issue 1, 1987, Pages 270-274, ISSN 0021-9991, [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(87\)90081-7](https://doi.org/10.1016/0021-9991(87)90081-7). (<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999187900817>)
- [4] Walters, S. J., Turner, R. J., & Forbes, L. K. (2022). A comparison of explicit Runge–Kutta methods. *ANZIAM Journal*, 64(1), 227–249. (<https://doi.org/10.1017/S1446181122000141>)

Anexos

Códigos: <https://drive.google.com/drive/folders/1EydbvJYPTm-fo-m6YARI8s66JWIJvogD?usp=sharing>