

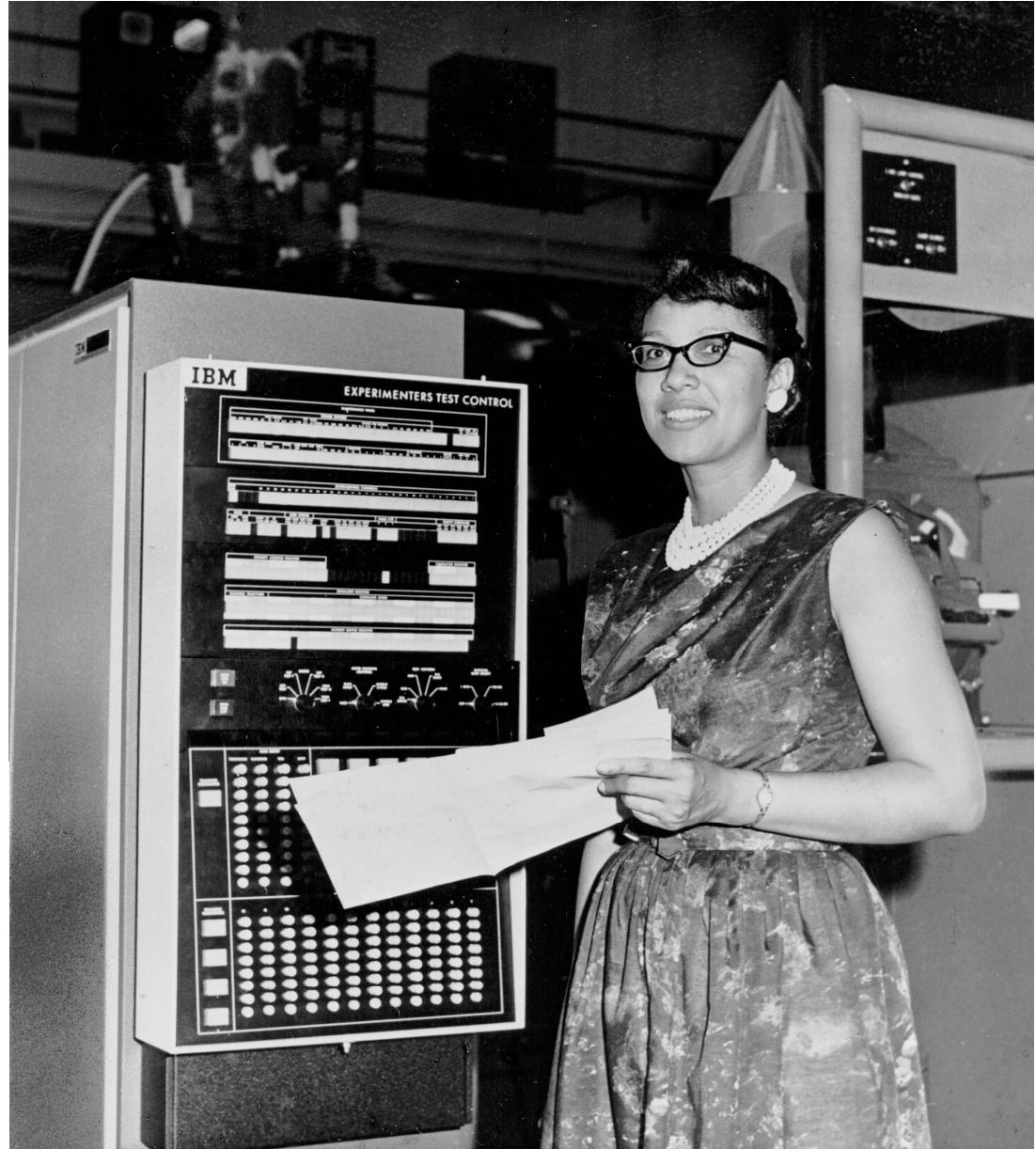
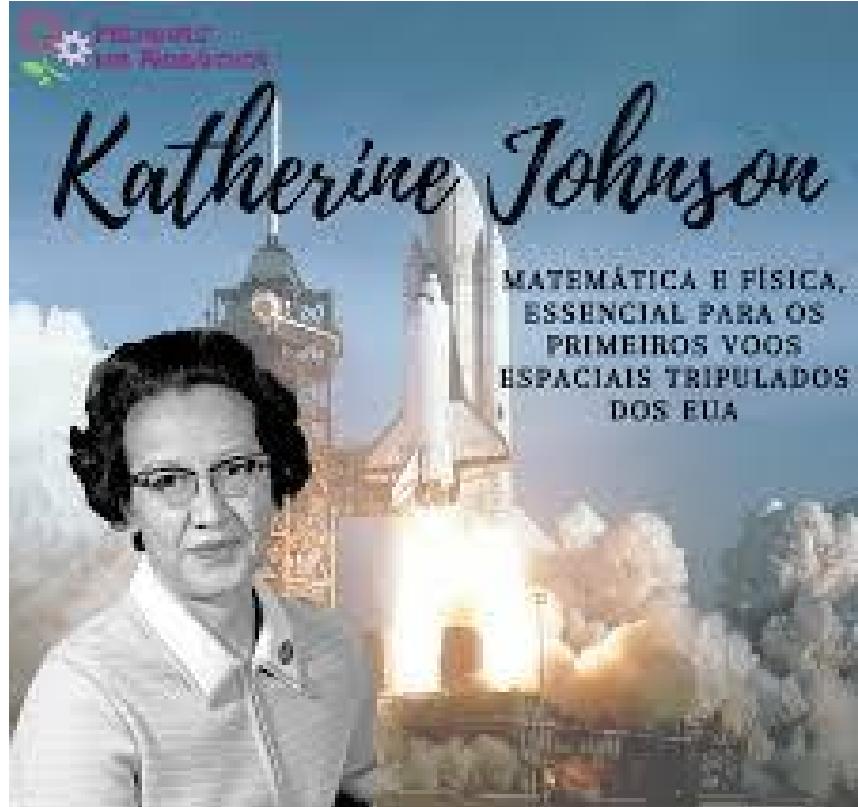
Proyecto Computacional 2

para realizar como trabajo grupal

Fecha entrega: Jueves 10 de Abril

Método numérico para hallar las funciones de onda
y valores propios de energía para el átomo de hidrógeno.

FÍSICA MODERNA
Marzo – Abril de 2025
Profesor Bernardo Gómez Moreno



Katherine Johnson

1920 - 2020

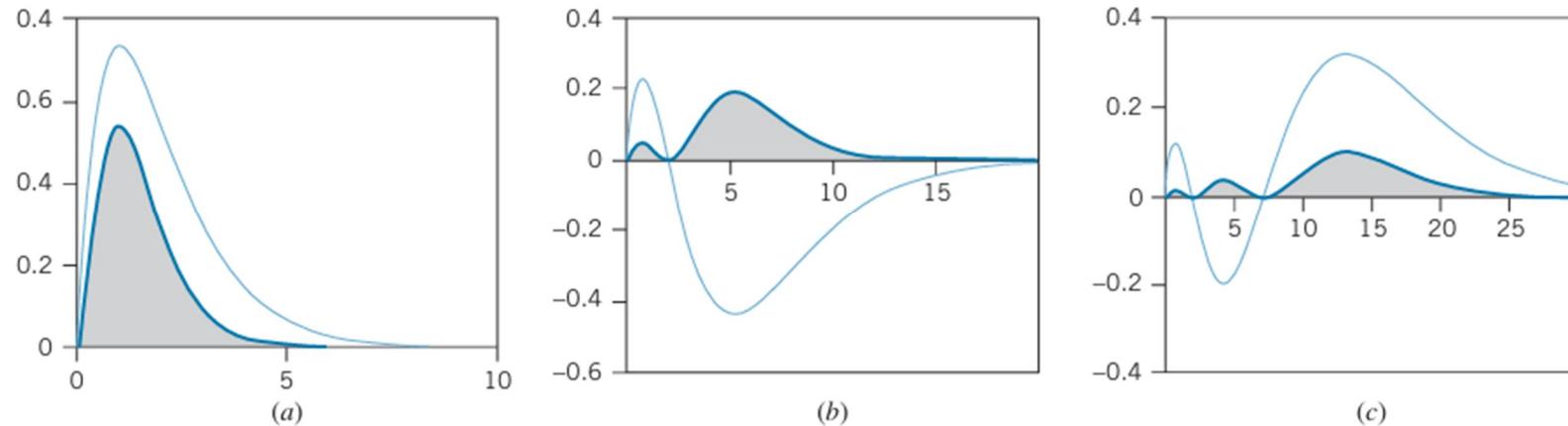


Katherine Johnson

1920 - 2020



Método numérico para hallar las funciones de onda y valores propios de energía para el átomo de hidrógeno.

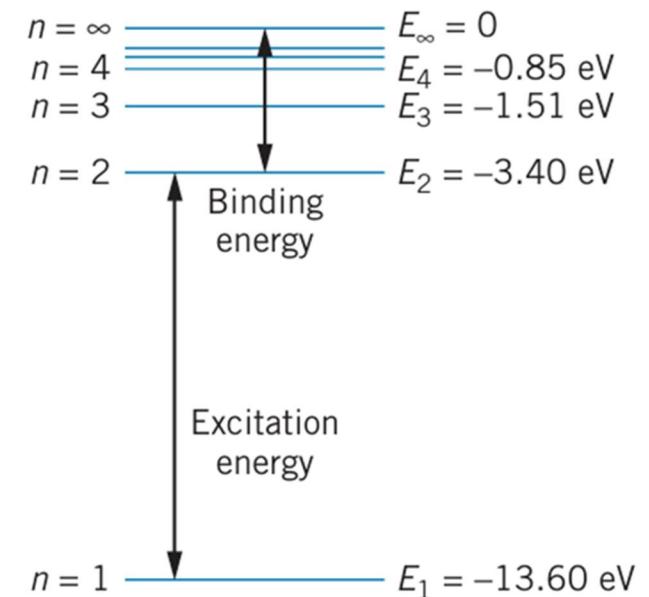


Funciones de onda y densidades de probabilidad (áreas sombreadas) para un electrón ligado en un potencial de energía de Coulomb unidimensional.

Para el átomo de hidrógeno construimos numéricamente la serie de funciones de onda del electrón que corresponden a los diversos estados de excitación del átomo.

Aplicamos la Ecuación de Schrödinger en una dimensión para obtener para cada estado de excitación la función de onda del electrón y su correspondiente energía.

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



La Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en una dimensión es:

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

El electrón está inmerso en el campo eléctrico de Coulomb del núcleo atómico, que en este caso es un protón, su carga eléctrica $+e$.

Así en este caso para el electrón de carga eléctrica $-e$ la energía potencial es:

$$U(x) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 x} = -\frac{D}{x}$$

donde D

$$D = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

Escribimos la Ecuación de Schrödinger en forma adecuada para construir numéricamente la función de onda, así

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

y ponemos

$$C = \frac{2m}{\hbar}$$

Entonces:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -C \cdot \left(E + \frac{D}{x} \right) \cdot \psi(x)$$

Procedemos a construir numéricamente la función de onda $\psi(x)$ avanzando en x en pasos Δx :

$$x \rightarrow x + \Delta x$$

En $x + \Delta x$ el nuevo valor de la función de onda es:

$$\psi(x + \Delta x) = \psi(x) + \frac{d\psi}{dx} \Big|_{x+\Delta x/2} \cdot \Delta x$$

El cambio de $\psi(x)$ al avanzar un paso Δx es:

$$\frac{d\psi}{dx} \Big|_{x+\Delta x/2} = \frac{d\psi}{dx} \Big|_{x-\Delta x/2} + \frac{d^2\psi}{dx^2} \Big|_x \cdot \Delta x$$

y utilizamos la Ecuación de Schrödinger:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} \Big|_x = -C \cdot \left(E + \frac{D}{x} \right) \cdot \psi(x)$$

con $C = \frac{2m}{\hbar}$ y $D = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$

E es la energía que corresponde al estado de excitación, que queremos hallar.

La construcción numérica de la función de onda, requiere los datos iniciales, en $x = 0$, para la función de onda $\psi(x)$ y su primera derivada $d\psi / dx$.

Ponemos $\psi(0) = 0$ y $\frac{d\psi}{dx} \Big|_{x=0} = 0.5$.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} \Big|_x = -C \cdot \left(E + \frac{D}{x} \right) \cdot \psi(x)$$

E es la energía que corresponde
al estado de excitación... ¿Qué valor tiene?

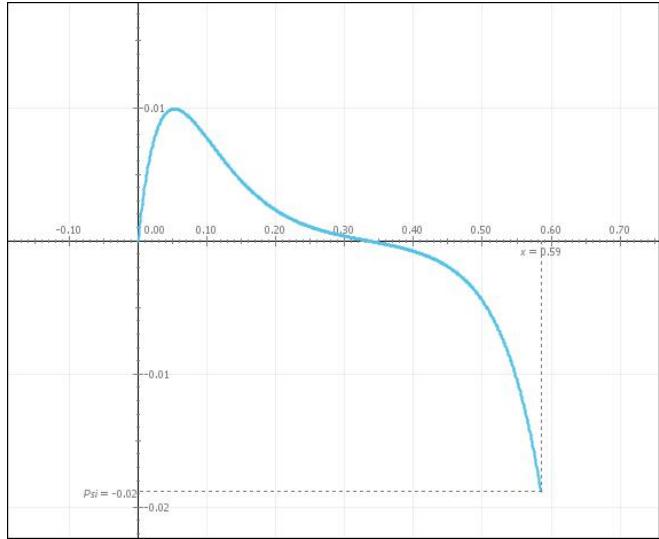
Es precisamente lo que queremos hallar.

Importante, la clave para determinar los valores propios de energía:

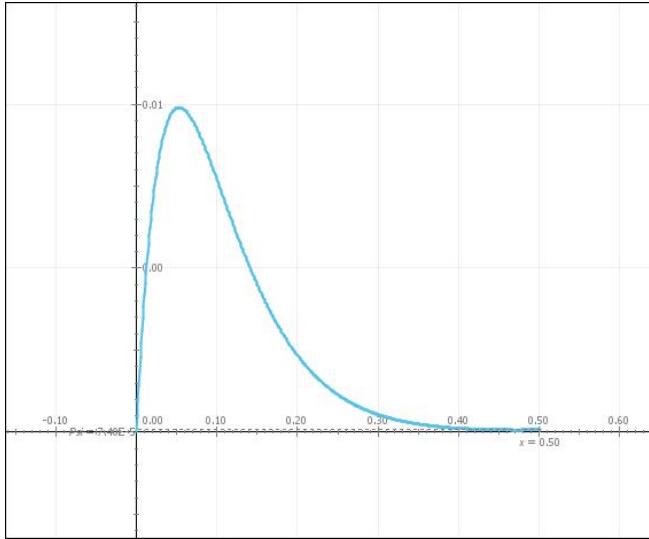
La función de onda debe cumplir la condición $\psi(x) \rightarrow 0$ para $x \rightarrow \infty$.

Y solo para los valores propios de energía E se cumple esta condición.

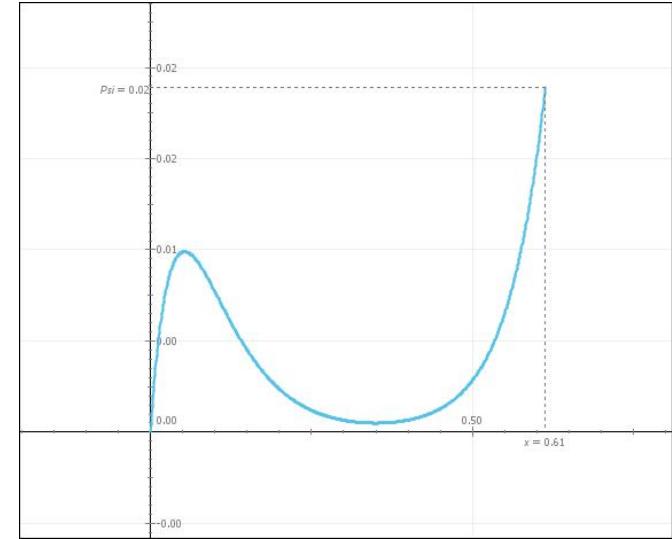
Variando el valor de E , por encima o por debajo del valor propio admitido, así sea muy pequeño el cambio, la función de onda se va a $\rightarrow \infty$.



$$E = -13.54 \text{ eV}$$



$$E = -13.5525 \text{ eV}$$



$$E = -13.56 \text{ eV}$$

Desde el comienzo, para iniciar el cálculo numérico ponemos un valor para E , que consideramos realista, "*disparamos un E*", nos podemos inspirar en los valores conocidos del modelo atómico de Bohr para el átomo de hidrógeno.

Seguramente para el "valor disparado" la función de onda resultante tiende a ∞ para x grande. Observamos si va a $+\infty$, o si va a $-\infty$.

Modificamos un poco el valor de E y observamos nuevamente el comportamiento de $\psi(x)$. Si va al infinito en sentido opuesto al del intento anterior, ya pasamos sobre el valor correcto de E , y ensayamos un valor intermedio de E , entre el que llevó a $\psi(x) \rightarrow +\infty$ y el que llevó a $\psi(x) \rightarrow -\infty$. Así nos vamos ubicando con E hasta lograr $\psi(x) \rightarrow 0$ para x grande.

Procedemos a construir numéricamente la función de onda $\psi(x)$ avanzando en x en pasos Δx :

$$x \rightarrow x + \Delta x$$

En $x + \Delta x$ el nuevo valor de la función de onda es:

$$\psi(x + \Delta x) = \psi(x) + \frac{d\psi}{dx} \Big|_{x+\Delta x/2} \cdot \Delta x$$

El cambio de $\psi(x)$ al avanzar un paso Δx es:

$$\frac{d\psi}{dx} \Big|_{x+\Delta x/2} = \frac{d\psi}{dx} \Big|_{x-\Delta x/2} + \frac{d^2\psi}{dx^2} \Big|_x \cdot \Delta x$$

y utilizamos la Ecuación de Schrödinger:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} \Big|_x = -C \left(E + \frac{D}{x} \right) \cdot \psi(x)$$

con $C = \frac{2m}{\hbar}$ y $D = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$

E es la energía que corresponde al estado de excitación, que queremos hallar.

Tarea:

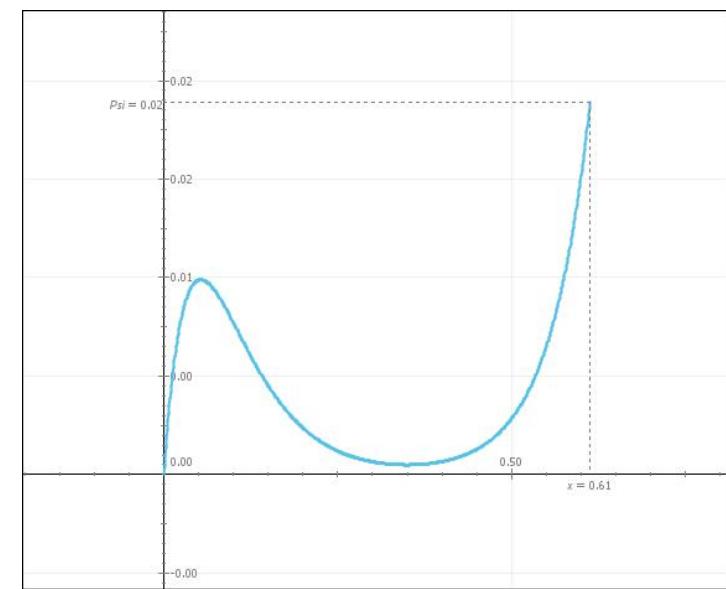
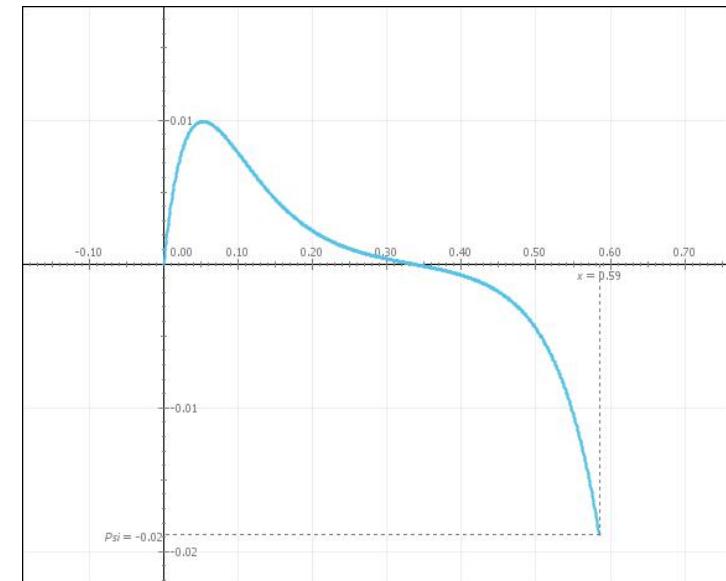
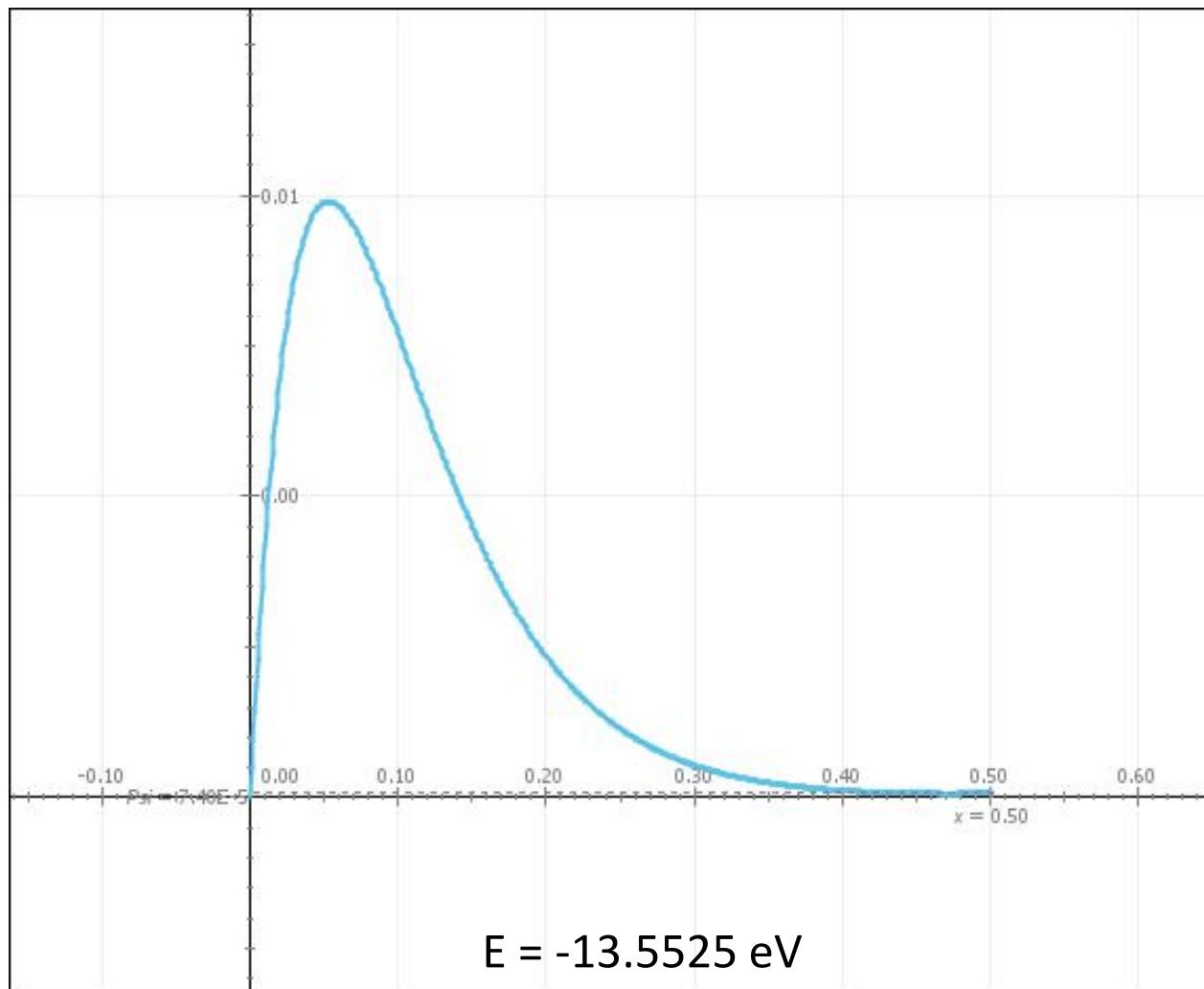
- Implementar este método computacional, un algoritmo para su realización:
- Hallar las funciones de onda del electrón en el campo de Coulomb para los cuatro primeros "estados estacionarios": las funciones de onda y los valores propios de energía correspondientes.
- Graficar las funciones de onda obtenidas.

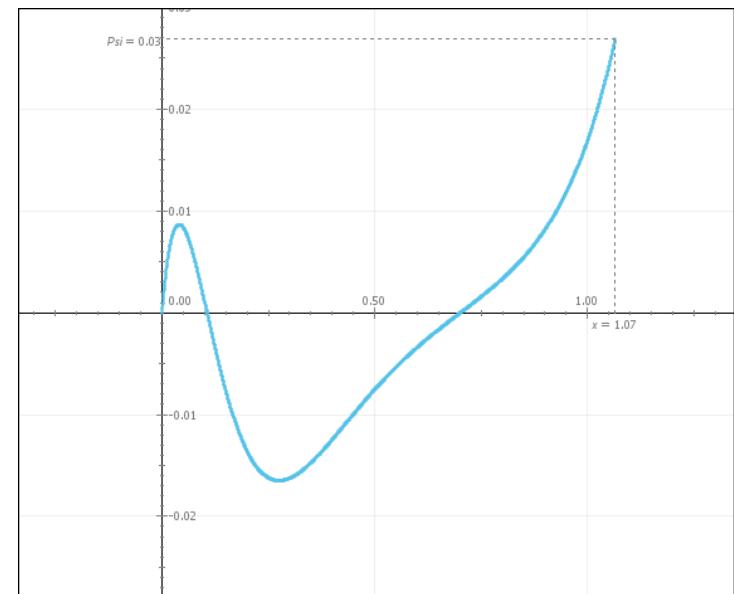
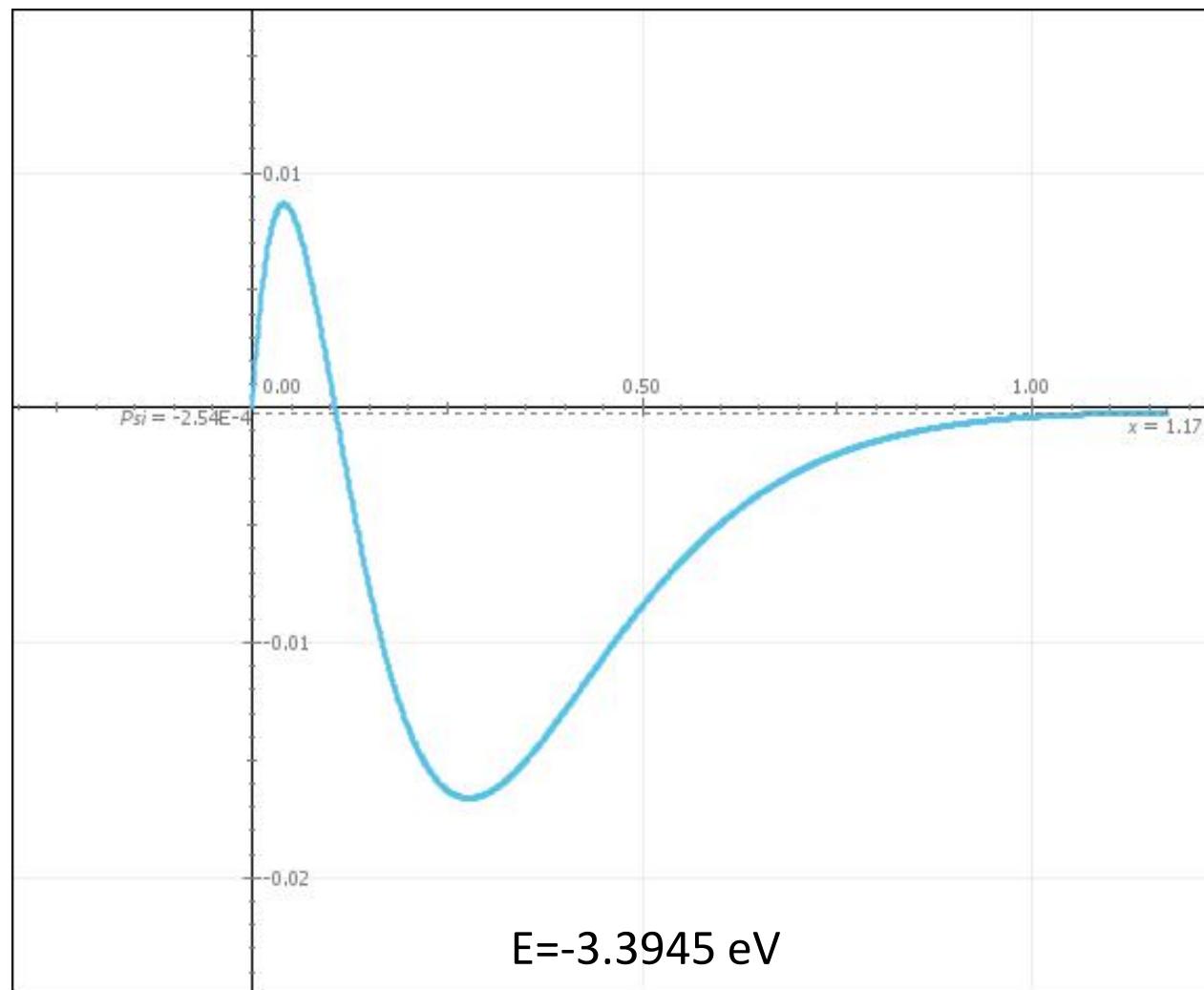
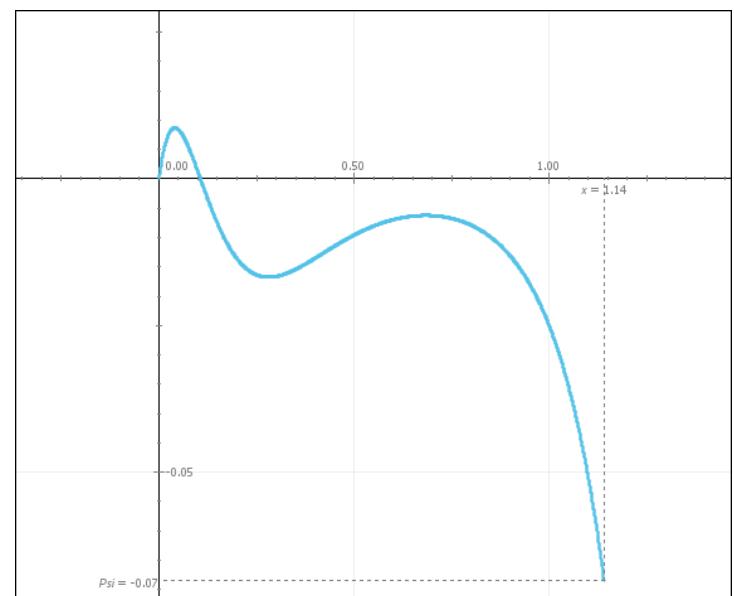
	A	B	C	D	E	F
1	$E =$	-13,6		$C =$	26,24	
2	$\psi(0) =$	0		$D =$	1,44	
3	$\psi'(0) =$	0,5		$U=-D/x$		
4	$\Delta x =$	0,001				
5						
6	x	$x + \Delta x/2$	U(x)	$\psi(x)$	$\psi'(x+\Delta x/2)$	$\psi''(x)$
7	0	0,0005	-2,88E+03	0	0,5	0
8	0,001	0,0015	-1,44E+03	0,0005	0,5	-19,071232
9	0,002	0,0025	-7,20E+02	0,001	0,48092877	-18,535936
10	0,003	0,0035	-4,80E+02	0,00148093	0,46239283	-18,124104
11	0,004	0,0045	-3,60E+02	0,00194332	0,44426873	-17,663892
12	0,005	0,0055	-2,88E+02	0,00238759	0,42660484	-17,191262
13	0,006	0,0065	-2,40E+02	0,0028142	0,40941357	-16,718391
14	0,007	0,0075	-2,06E+02	0,00322361	0,39269518	-16,250466
15	0,008	0,0085	-1,80E+02	0,0036163	0,37644472	-15,789998

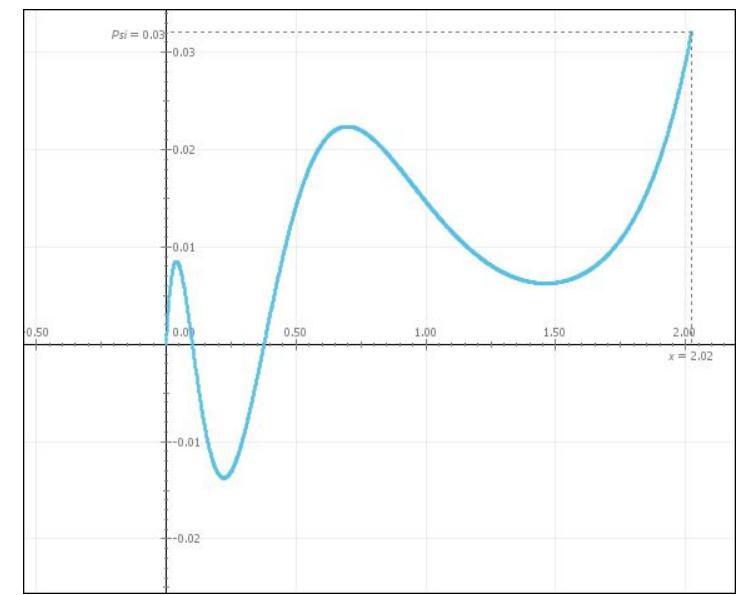
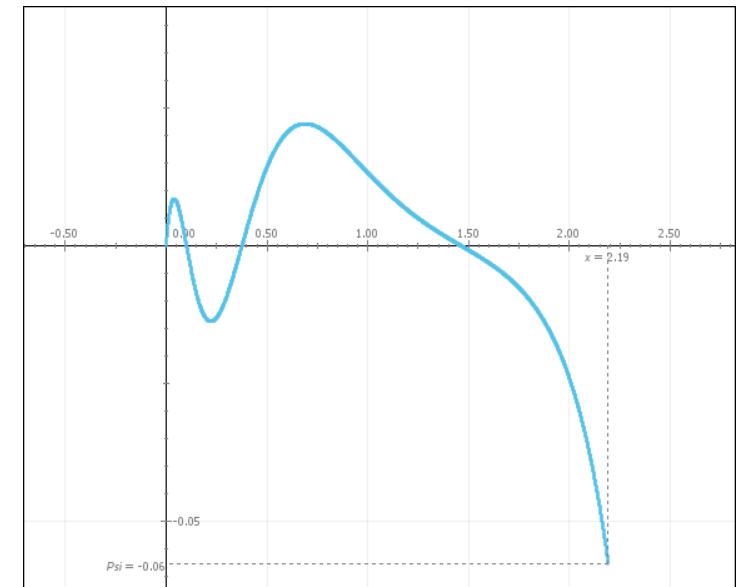
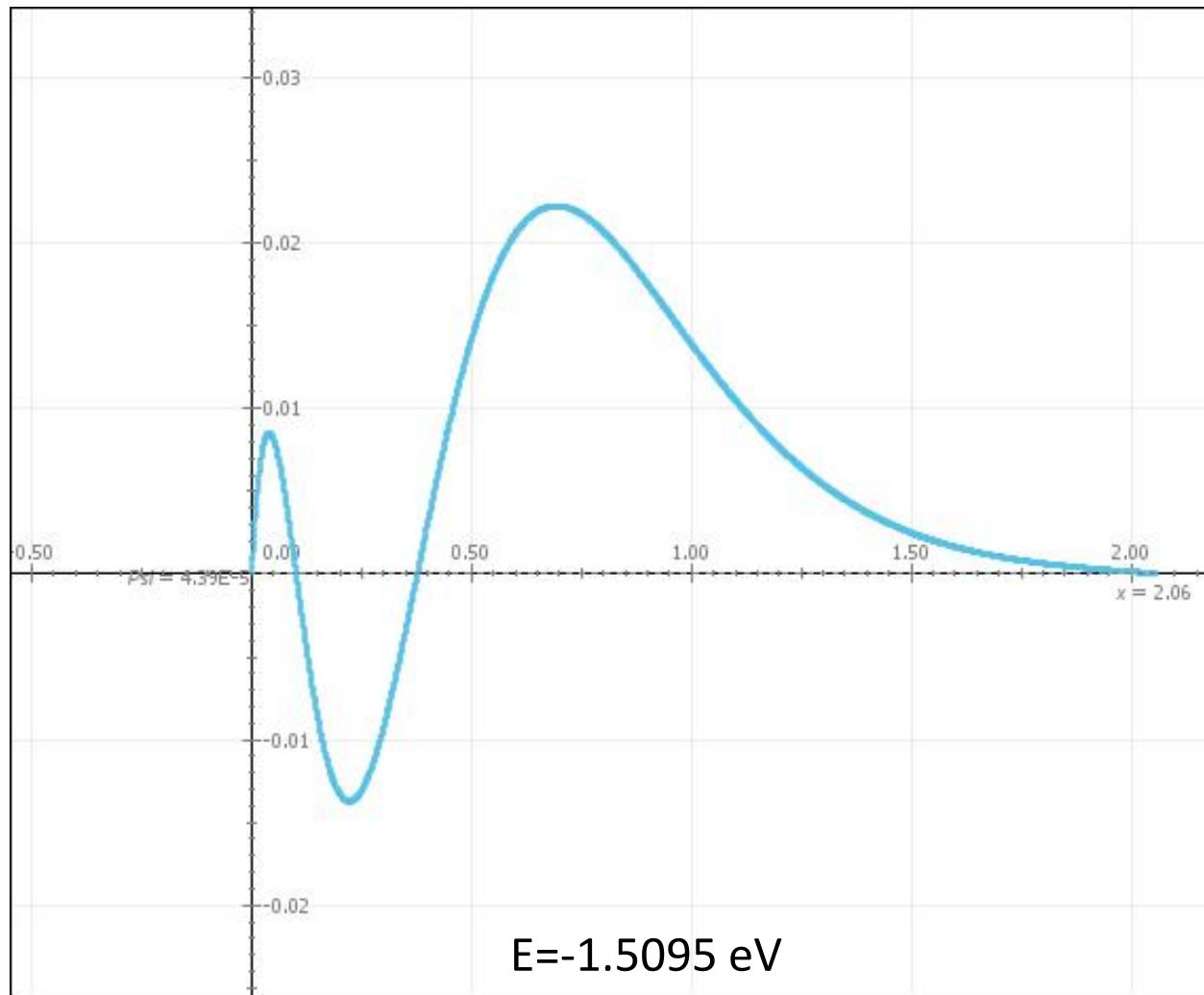
Siguen ahora ejemplos de este método.

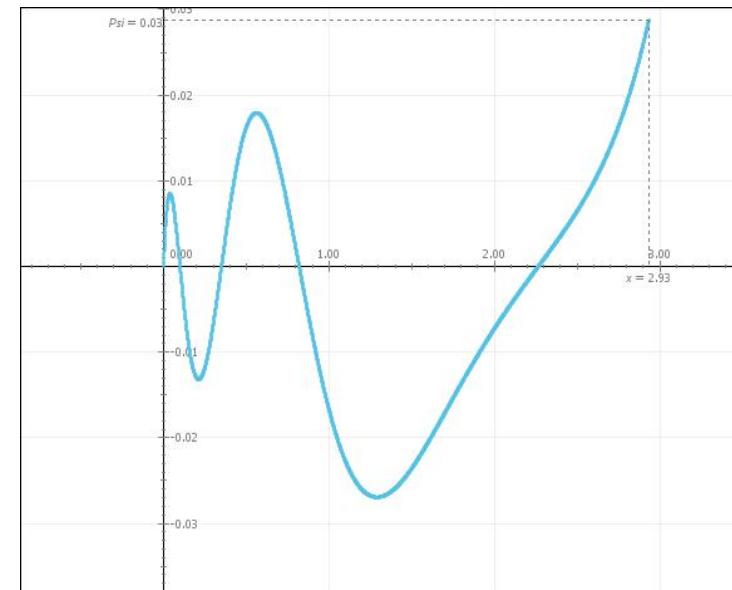
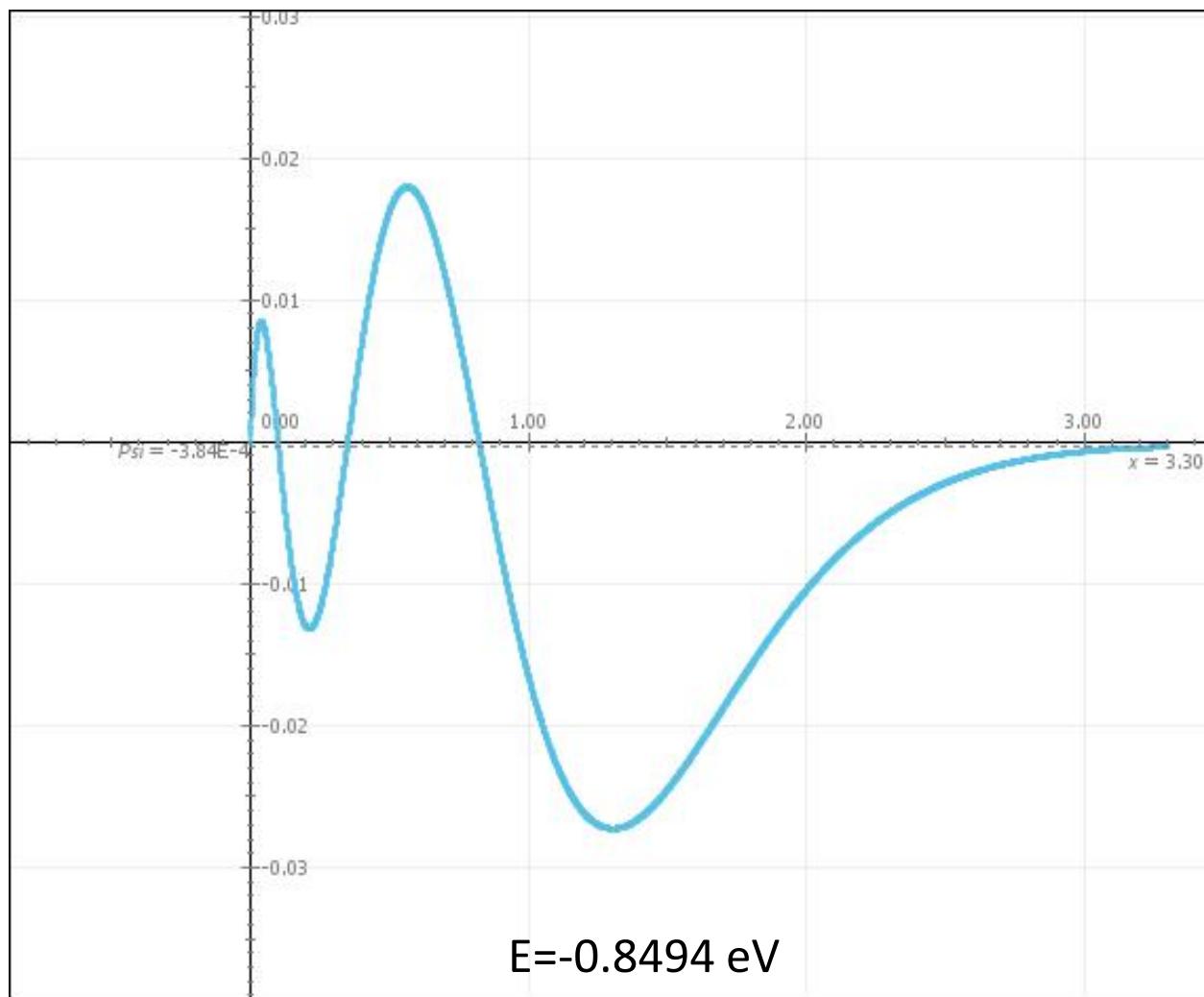
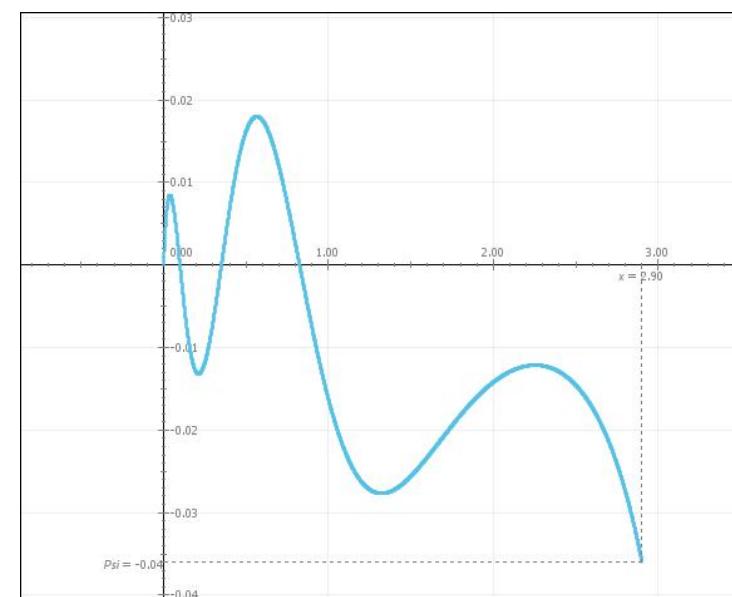
Prof. Bernardo Gómez, utilizando el software Modellus para este cálculo numérico,
y el mismo método con herramienta más simple, la hoja electrónica EXCEL.

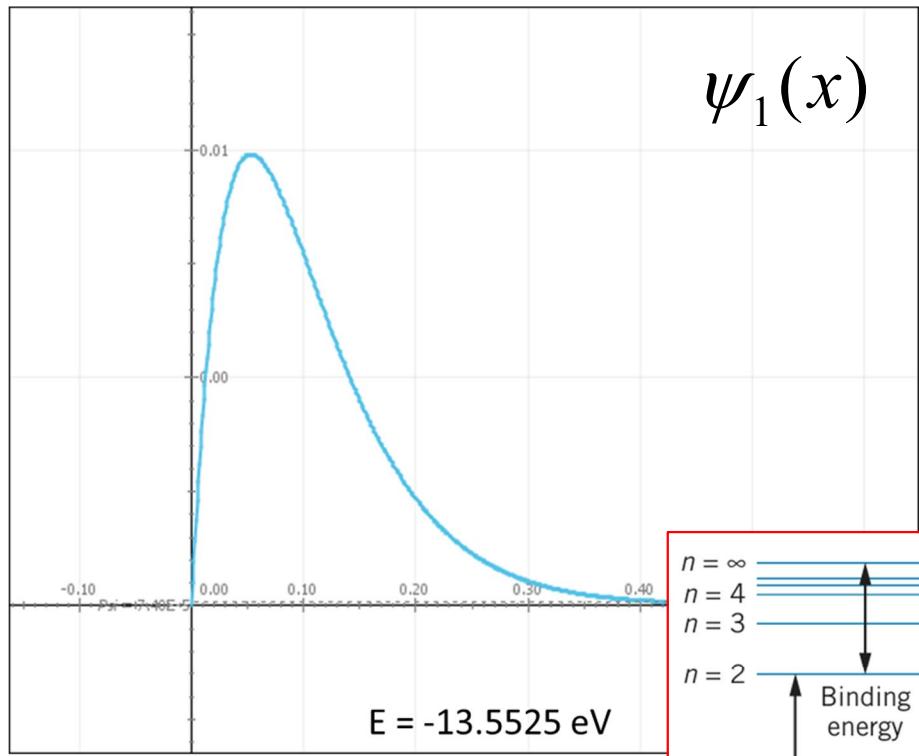
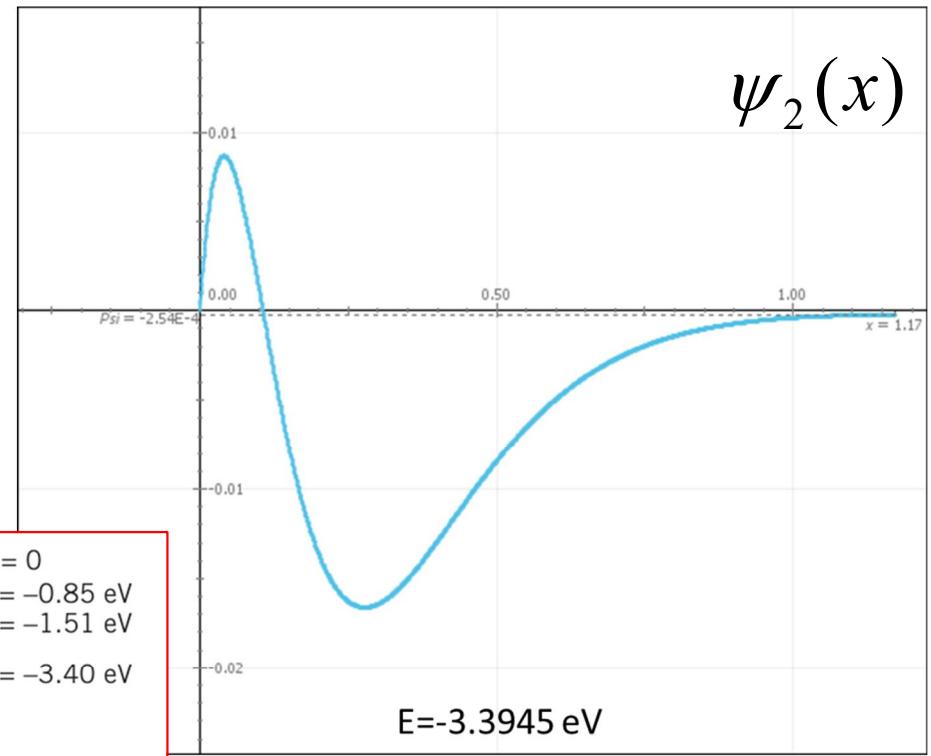
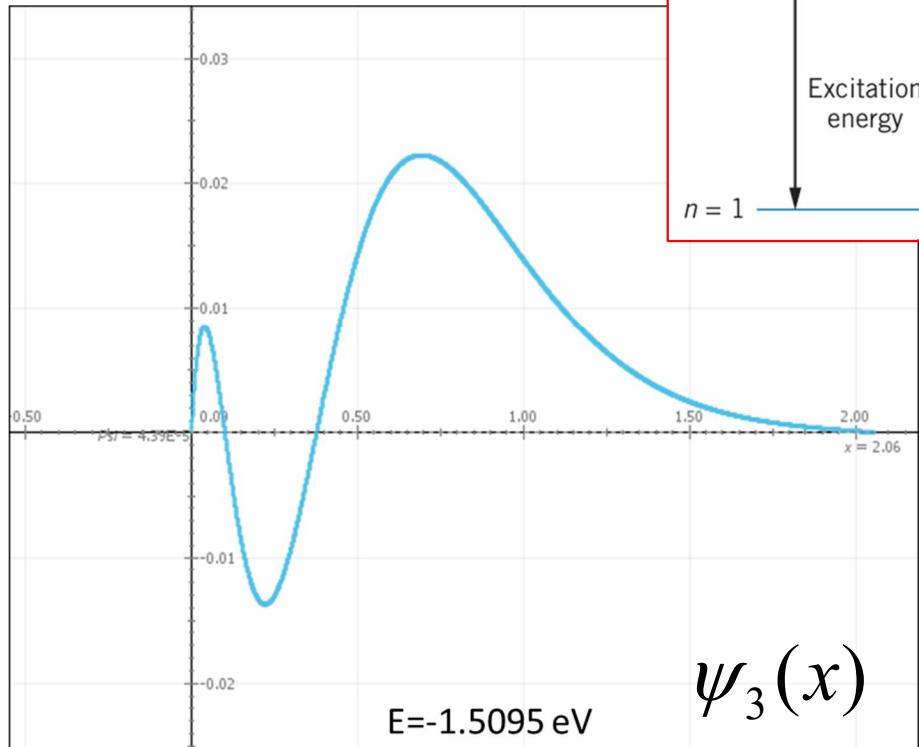
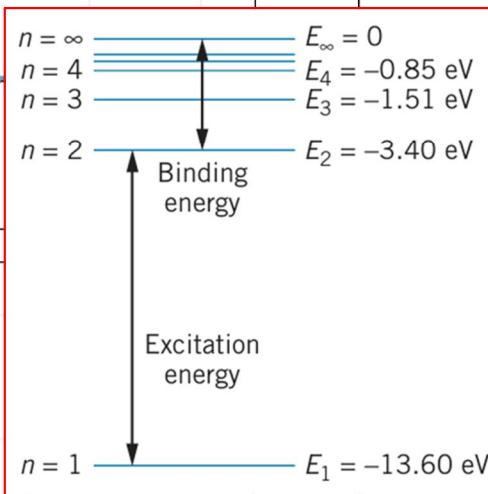
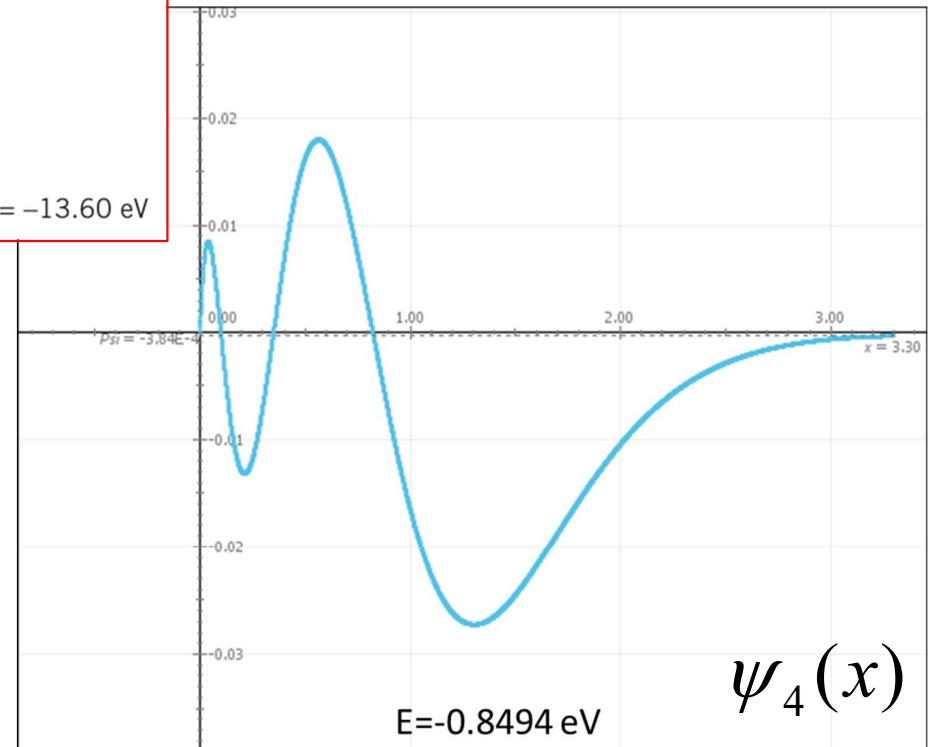
$\psi_1(x)$



$\psi_2(x)$  $E = -3.35 \text{ eV}$  $E = -3.45 \text{ eV}$

$\psi_3(x)$ 

$\psi_4(x)$  $E = -0.84 \text{ eV}$  $E = -0.86 \text{ eV}$


 $\psi_1(x)$

 $\psi_2(x)$

 $\psi_3(x)$

 $\psi_4(x)$

*... hasta aquí
el Proyecto Computacional 2*