

## Física numérica

### Tarea #7

#### Solución numérica de EDO

*Instrucciones: Las soluciones a los ejercicios deberán ser acompañadas del código utilizado.*

1. **Ecuación de Poisson.** Resuelva numéricamente la ecuación de Poisson

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = f(x, y),$$

con

$$f(x, y) = \cos(3x + 4y) - \cos(5x - 2y)$$

sujeta a las condiciones de frontera *periódicas*

$$\phi(x, 0) = \phi(x, 2\pi), \quad \phi(0, y) = \phi(2\pi, y).$$

Indique el método elegido (Jacobi o Gauss-Seidel), presente su resultado en forma gráfica.

2. **Estados ligados en un potencial arbitrario.** Una partícula cuántica en un estado estacionario de energía definida  $E$  se encuentra ligada por un potencial  $1D$ . Su función de onda se determina por la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V(x) \psi(x) = \kappa^2 \psi(x), \quad \kappa^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} E.$$

Cuando la partícula está ligada, tenemos que está confinada a cierta región *finita* del espacio, por lo que  $\psi(x)$  es normalizable. Esto nos dice que la energía debe ser negativa para que  $\psi(x)$  decaiga exponencialmente cuando  $x \rightarrow \pm\infty$ :

$$\psi(x) \rightarrow \begin{cases} e^{-\kappa x}, & \text{cuando } x \rightarrow +\infty, \\ e^{+\kappa x}, & \text{cuando } x \rightarrow -\infty. \end{cases}$$

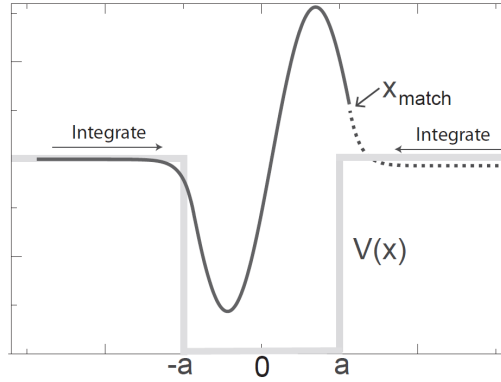
Aunque la ecuación puede resolverse con algún método numérico (Runge-Kutta, por ejemplo), el extra aquí es que también debemos tener que la solución  $\psi(x)$  debe satisfacer las condiciones de frontera anteriores. Esta condición adicional convierte al problema de la EDO en un problema de eigenvalores en el cual existe solución solo para ciertos valores

del eigenvalor  $E$ . La solución, si existe, se sigue de encontrar una energía permitida, resolver la ecuación y después variar la energía como parte de un problema de prueba y error (búsqueda de raíces) para la función de onda que satisfaga las condiciones de frontera. Se sugiere:

- (a) Iniciar su programa del lado izquierdo lo más *lejano* posible en  $x = -X$ , donde  $X \gg a$ . Aquí  $X$  es su aproximación numérica a  $\infty$  para el cual  $V(-X) \approx 0$  y  $\psi \sim e^{-\kappa X}$

$$\psi_L(x = -X) = e^{+\kappa(x=-X)} = e^{-\kappa X}.$$

- (b) Utilice un método para resolver la EDO avanzando con pasos en  $\psi_L(x)$  hacía el origen (hacia la derecha) desde  $x = -X$ , hasta que llegue al radio de "pegado"  $x_m$  cerca la región del potencial. El valor exacto de  $x_m$  no es importante, su solución final debe ser independiente de él. En la figura puede observar un ejemplo de solución con  $x_m = a$ , esto es, se ha pegado en el borde derecho del pozo de potencial (ya que el potencial es cero para  $x < a$ , la función de onda tiene su forma sintótica).



- (c) Ahora inicie su programa en el extremo derecho, esto es, en  $x = X \approx +\infty$ , con una función de onda que satisface la condición de frontera en el lado derecho:

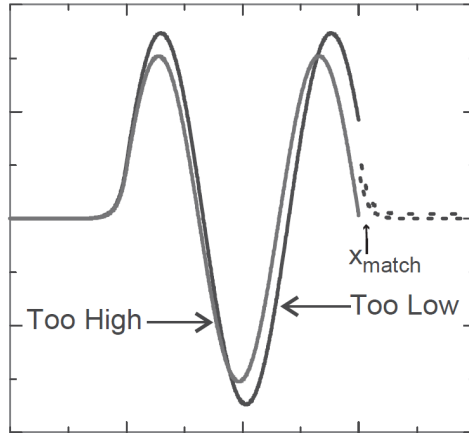
$$\psi_R(x = X) = e^{-\kappa(x=X)} = e^{-\kappa X}.$$

- (d) Nuevamente, utilice un método para resolver la EDO avanzando con pasos en  $\psi_R(x)$  hacía el origen (hacia la izquierda) desde  $x = X$ , hasta que llegue al radio de "pegado"  $x_m$  cerca la región del potencial.

- (e) Para que la probabilidad y la corriente sean continuas en  $x = x_m$ ,  $\psi(x)$  y  $\psi'(x)$  deben ser continuas ahí. Una condición que combina ambas y es independiente de la normalización es requerir que la *derivada logarítmica*  $\frac{\psi'(x)}{\psi(x)}$  sea continua. Incorpore esta condición en su programa tanto para la función de onda izquierda como la función de onda derecha.
- (f) Un buen estimado para la energía del estado base sería un valor un poco arriba del fondo del pozo  $|E| < V_0$ . Es poco probable que las funciones de onda izquierda y derecha coincidan en una estimación arbitraria, por lo que debemos medir en cuánto difieren en derivadas logarítmicas:

$$\Delta(E, x) = \frac{\frac{\psi'_L(x)}{\psi_L(x)} - \frac{\psi'_R(x)}{\psi_R(x)}}{\frac{\psi'_L(x)}{\psi_L(x)} + \frac{\psi'_R(x)}{\psi_R(x)}} \bigg|_{x=x_m},$$

donde el denominador se ha incluido para limitar la magnitud de  $\Delta$ . Use esta medida para buscar una energía tal que  $\Delta = 0$  dentro de *cierta tolerancia*. Por ejemplo, la figura siguiente muestra algunas propuestas que no coinciden:



El pseudocódigo del programa, usando Runge-Kutta y el algoritmo de bisección, puede ser

```

Import library functions
Define Constants
Define the RHS function f(x,y) for ODE
Define potential function V(x)
Define ODE solution function diff(h)
Define plotting function plot(h)
    Integrate left Psi    -> from -Inf to Rmatch
    Integrate right Psi   <- from Inf to Rmatch
Normalize left Psi to match right Psi
Use bisection algorithm search on E
    Quit when L & R log(deriv) < eps or after Nmax iterations

```

El ejemplo ha sido con un pozo de potencial, pero puede generalizarse a un potencial arbitrario. Un estado ligado por definición está confinado a una región del espacio. En la mayoría de los casos esto significa que la función de onda lejos de la influencia del potencial decae exponencialmente. De acuerdo a esto, una forma rápida, pero no siempre eficaz, de encontrar un estado ligado es el integrar desde el origen y ver si la función de onda externa es una exponencial que decae. El problema con este método es que puede llevar a grandes acumulaciones de error y, por lo tanto, a resultados no deseados. Para  $x$  grande, tanto  $\exp(-\kappa x)$  y  $\exp(\kappa x)$  son soluciones válidas para la EDO, pero no para el problema de eigenvalores. Por lo que si usted inicia con una solución numérica que se comporta como  $\exp(-\kappa x)$  e integra hacía mayores  $x$ , la pequeña cantidad inicial de  $\exp(\kappa x)$  crecerá como crece  $x$ , mientras que  $\exp(-\kappa x)$  se irá haciendo más pequeña.