Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Mecánica Cuántica

Soluciones numéricas a la ecuación de Schrödinger unidimensional

Maldonado Zamora Silvia Viridiana

¿Por qué resolver la ecuación de Schrödinger numéricamente?

La ecuación de Schrödinger es fundamental en la mecánica cuántica, pero solo puede resolverse analíticamente en un número limitado de casos.

En este proyecto se plantea la construcción de algunos métodos que son puestos a prueba sobre problemas de los que se conoce su solución exacta y también se exploran sistemas donde las soluciones analíticas no son tan inmediatas.

Se abordará la ecuación estacionaria:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) = 0$$

Métodos Numéricos Utilizados

- Diferencias finitas centradas
- Algoritmo QR
- Método de Numerov
- Runge-Kutta de orden 4
- Método de disparo (shooting)

Diferencias finitas centradas

Permite aproximar derivadas utilizando desarrollos de Taylor. Para la segunda derivada:

$$f''(x) \approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}$$

Orden de error: $\mathcal{O}(h^2)$

- Permite la discretización de la ecuación de Schrödinger, lo cual permite plantearla como un problema de eigenvalores de una matriz tridiagonal.
- También puede emplearse para la verificación de eigenfunciones en un problema donde se conozca explícitamente ψ

Algoritmo QR

Método iterativo para calcular autovalores de una matriz simétrica A:

$$A_k = Q_k R_k, \quad A_{k+1} = R_k Q_k$$

Con suficientes iteraciones:

$$A_k \longrightarrow D$$

donde D es diagonal con los autovalores de A, y $V = Q_1 Q_2 \cdots Q_k$ contiene los autovectores.

Orden de error: Depende del número de iteraciones y condición de A

Método de Numerov

Integrador especializado para ecuaciones del tipo $y'' + k(x)y = 0$. La forma discretizada es:

$$y_{n+1} = 2y_n - y_{n-1} + \frac{h^2}{12}\left(k_{n+1}y_{n+1} + 10k_ny_n + k_{n-1}y_{n-1}\right)$$

que se resuelve iterativamente.

Orden de error: $\mathcal{O}(h^6)$

Tiene una gran versatilidad para resolver problemas de potenciales al ser estos independientes de la implementación del método.

Runge-Kutta de orden 4

Es un método para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias de la forma $x'(t) = f(t, x(t)), \quad x(t_0) = x_0$

Utiliza una media ponderada de pendientes:

$$k_1 = f(t_n, y_n)$$

$$k_2 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1\right)$$

$$k_3 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_2\right)$$

$$k_4 = f(t_n + h, y_n + hk_3)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

Orden de error: $\mathcal{O}(h^4)$

- Si bien la ecuación de Schrodinger 1D independiente del tiempo es de segunda grado, es posible plantear un sistema de ecuaciones tal que pueda abordarse como una EDO.
- El método se utiliza dentro del método de Shooting para ajustar la energía.

Método de disparo (shooting)

- Transforma un problema de valores en la frontera en uno de valores iniciales.

- Se prueba con una propuesta de energía tentativa E, y se integra con un **método como RK4**. Luego, se ajusta E iterativamente hasta cumplir la condición en el borde derecho.

- **Error total:** Depende del integrador (ej. RK4 con $\mathcal{O}(h^4)$) y del método de ajuste (ej. secante con convergencia superlineal).

- Es útil para el cálculo de autovalores energéticos en sistemas ligados.

Estructura del proyecto

- SCHRODINGER_1D
  - metodos
    - __pycachee__
    - libMetodos.py
    - sobreMetodoss.ipynb
  - problemas
    - armonico_Numerov.ipynb
    - difinitas.ipynb
    - edoBase_Shooting.ipynb
    - gr.ipynb
  - .gitignore
  - README.md

Librería hecha a mano que incluye los cinco métodos anteriores

Breve descripción y derivación de los métodos

Potencial armónico implementando método de Numerov

Verificación de eigenfunciones para el pozo infinito usando diferencias finitas

Potencial cuadrado con paredes infinitas implementando Shooting (RK4 y secante)

Pozo de ancho L con potencial no constante implementando método QR

Implementación en potenciales específicos

Revisando brevemente los problemas abordados...

Guerra de métodos

- Se resolvió la ecuación de Schrödinger 1D con diversos métodos numéricos.
- Cada método tiene fortalezas según el tipo de problema.
- No hay un “mejor método” absoluto: la elección depende del contexto.
- En términos de precisión, destacan:
  - Runge-Kutta de orden 4 (RK4)
  - Método de Numerov
- El repositorio es útil tanto para docencia como para experimentación computacional.
- Proyecto en crecimiento (2D, potenciales no triviales, etc.).

Repositorio en GitHub

Todo el desarrollo de este proyecto está disponible en GitHub.

Escanea el código QR para revisarlo.

Referencias

- Newman, M. E. J. (2013). *Computational physics*. CreateSpace Independent Publishing Platform.
- Burden, R. L., & Faires, J. D. (2010). *Numerical analysis* (9.ª ed.). Brooks/Cole, Cengage Learning.
- Caruso, F., Oguri, V., & Silveira, F. (2022). *Applications of the Numerov method to simple quantum systems using Python*. Revista Brasileira de Ensino de Física, 44, e20220098. https://doi.org/10.1590/1806-9126-RBEF-2022-0098
- Evans, M. (s.f.). *Schroedinger Equation in Harmonic Potential* [Código fuente]. Recuperado de https://mtdevans.com/js/sch.py.txt