Soluciones numéricas a la ecuación de Schrödinger para potenciales centrales

Para pot. centrar $\Psi(\vec{r}) = R(r)Y(\theta,\varphi)$
$u(r) = rR(r)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r)\right]u(r) = Eu(r)$$

Para solución numérica hay que adimensionalizar.

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{(e^2/4\pi\epsilon_0)\,m} \qquad r = a_0\rho \Rightarrow \frac{d^2}{dr^2} = \frac{1}{a_0^2}\frac{d^2}{d\rho^2}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2ma_0^2}\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2ma_0^2\rho^2} + V(a_0\rho)\right]u(a_0\rho) = E\,u(a_0\rho)$$

$$\tilde{E} = \frac{ma_0^2}{\hbar^2}E$$

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{2\rho^2} + \frac{ma_0^2}{\hbar^2}V(a_0\rho)\right]u(a_0\rho) = \tilde{E}\,u(a_0\rho)$$

$$\tilde{V}(\rho) = \frac{ma_0^2}{\hbar^2}V(a_0\rho)$$

$$\tilde{u}(\rho) = u(a_0\rho)$$

Para hidrógeno $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

$$\tilde{V}(\rho) = -\frac{m a_0^{\cancel{2}}}{\hbar}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cancel{a_0}\rho} = -\frac{1}{\rho}$$

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2}\frac{1}{n^2} \Rightarrow \tilde{E}_n = -\frac{1}{2n^2}$$

$$\tilde{u}''(\rho) = \left[\frac{l(l+1)}{\rho^2} + 2\tilde{V}(\rho) - 2\tilde{E}\right]\tilde{u}(\rho)$$

De aquí en adelante usamos esta ec. y no ponemos $\sim$.

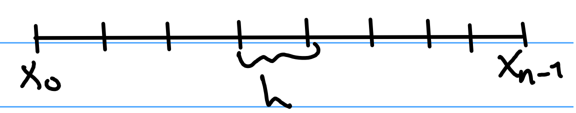
Para resolverla usaremos el método de Numerov.

Método de Numerov

$$y''(x) + Q(x)y(x) = S(x)$$

Para nuestro caso:
$Q(x) = 2\tilde{E} - 2V(x) - \frac{l(l+1)}{x^2}$
$S(x) = 0$

Discretizamos el problema



$$y(x_i) = y_i \quad Q(x_i) = Q_i \quad S(x_i) = S_i$$

$$y(x+h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2}y''(x) + \frac{h^3}{6}y'''(x) + \frac{h^4}{24}y''''(x) + O(h^5)$$

$$y(x-h) = y(x) - hy'(x) + \frac{h^2}{2}y''(x) - \frac{h^3}{6}y'''(x) + \frac{h^4}{24}y''''(x) + O(h^5)$$

Sumando

$$y(x+h)+y(x-h)=2y(x)+h^2y''(x)+\frac{h^4}{12}y''''(x)+O(h^6)$$

$$y_i''=\frac{y_{i+1}+y_{i-1}-2y_i}{h^2}-\frac{h^2}{12}y_i''''+O(h^4)$$

Para y'''' podemos usar $y''=-(Qy-S)$

$$y''''=-(Qy-S)''$$

$$y''''=-\frac{1}{h^2}\left[(Q_{i+1}y_{i+1}+Q_{i-1}y_{i-1}-2Q_iy_i)-(S_{i+1}+S_{i-1}-2S_i)\right]+O(h^2)$$

Obtenemos

$$S_i-Q_iy_i=\frac{y_{i+1}+y_{i-1}-2y_i}{h^2}+\frac{1}{12}\left[(Q_{i+1}y_{i+1}+Q_{i-1}y_{i-1}-2Q_iy_i)-(S_{i+1}+S_{i-1}-2S_i)\right]$$

$$y_{i+1}\left(1+\frac{h^2}{12}Q_i\right)=2y_i\left(1-\frac{5h^2}{12}Q_i\right)-y_{i-1}\left(1+\frac{h^2}{12}Q_{i-1}\right)+\frac{h^2}{12}(S_{i+1}+S_{i-1}+10S_i)+O(h^6)$$

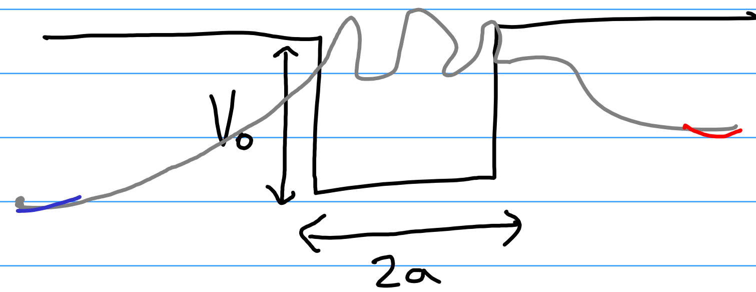
Para $S=0$

$$y_{i+1}=\frac{2\left(1-\frac{5h^2}{12}Q_i\right)y_i-\left(1+\frac{h^2}{12}Q_{i-1}\right)y_{i-1}}{\left(1+\frac{h^2}{12}Q_{i+1}\right)}$$

$$y_{i-1}=\frac{2\left(1-\frac{5h^2}{12}Q_i\right)y_i-\left(1+\frac{h^2}{12}Q_{i+1}\right)y_{i+1}}{\left(1+\frac{h^2}{12}Q_{i-1}\right)}$$

Ejemplo

$V(x) =$



$\psi''(x) + 2(E - V(x))\psi(x) = 0$ buscamos E y $\psi(x)$ que cumbla condiciones de frontera

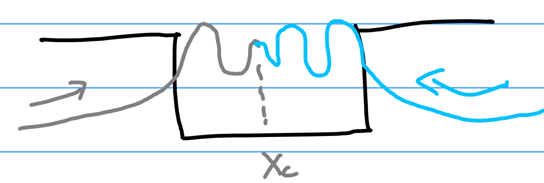
$$\psi(x) \xrightarrow[x \to \pm\infty]{} 0$$

Como no podemos $x \in (-\infty, \infty)$ tomamos $x \in (-x_m, x_m)$

Impezando con $E_t = -V_0 + \varepsilon$, $y_0 = 0$, $y_1 = \varepsilon' << 1$

Estrategia para encontrar los eigenvalores

- Elegir un E_t inicial
- Integrar $\psi_{\rightarrow}$ y $\psi_{\leftarrow}$ hasta un punto de encuentro x_c



- $err(E_t) = \dfrac{\psi'_{\rightarrow}}{\psi_{\rightarrow}} - \dfrac{\psi'_{\leftarrow}}{\psi_{\leftarrow}}$

- Cuando err = 0 las funciones se pegan bien

- Usando un método para encontrar raíces encontramos E^* que hace

$$err(E^*) = 0$$

Para calcular ψ' usamos:

$$y(x+h) = y(x) + h y'(x) + \frac{h^2}{2} y''(x) + \frac{h^3}{6} y'''(x) + \frac{h^4}{24} y''''(x) + O(h^5)$$

$$y(x-h) = y(x) - h y'(x) + \frac{h^2}{2} y''(x) - \frac{h^3}{6} y'''(x) + \frac{h^4}{24} y''''(x) + O(h^5)$$

$$\frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h} = y'(x) + O(h^3)$$

$$\frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{h} = y'_i$$

Para funciones radiales