

Solución Numérica de la Ecuación de Schrödinger para Orbitales de Átomos Hidrogenoides

Felipe H. Orellana^{1*}, Benjamín Toledo^{2†}

¹ Universidad de Chile, ² Universidad de Chile.

* felipe.orellana.s@ug.uchile.cl, † btoledoc@uchile.cl

1. Resumen

En la física escolar y en los primeros años de universidad suelen estudiarse mayoritariamente problemas sencillos, en el sentido matemático, pues éstos tienen una solución analítica explícita. La relevancia de los métodos numéricos radica en poder extender el análisis de un sistema físico, por complicado que sea, bajo soluciones aproximadas, cuya diferencia con la solución real es súmamente baja.

Un ejemplo claro de esto es el péndulo simple, cuya ecuación de movimiento es una ecuación diferencial no lineal que no tiene solución en funciones elementales y para estudiarla en los primeros años de universidad se suele hacer la aproximación para ángulos pequeños, permitiendo así, encontrar una solución acotada para pequeñas oscilaciones, sin embargo, utilizando métodos numéricos, puede construirse una solución aproximada que sí sea válida para cualquier ángulo, a priori.

Similarmente, es posible obtener una solución numérica para ecuaciones más complicadas, como lo es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (1)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (1)$$

que es una ecuación diferencial en derivadas parciales, que mediante una separación de variables [1], se puede simplificar la parte angular en una ecuación con una solución conocida como armónicos esféricos y en la ecuación diferencial ordinaria (2)

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V(r) - E)R(r) = l(l+1)R(r), \quad (2)$$

que usualmente suele resolverse numéricamente utilizando el método de Numerov [2]. En este trabajo, se busca resolverla utilizando éste método y con el método de Runge-Kutta a orden 4, para distintos valores de l , y graficándolos para, luego, realizar una comparación entre los resultados obtenidos por cada método numérico.

Este problema se resolverá para átomos hidrogenoides, es decir, átomos con un único electrón, por lo que el problema será modelado con el potencial de Coulomb.

2. Referencias

- [1] David Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics
- [2] Ira Levine, Quantum Chemistry