



VNIVERSIDAD  
D SALAMANCA

CAMPUS DE EXCELENCIA INTERNACIONAL

Soluciones a la ecuación de Dirac en un  
potencial confinante / Solutions to the  
Dirac equation with a confining  
potential.

Autor: *Álvaro Rodríguez Martín*, con DNI: 70899686-R

Dirigido por: *Conrado Albertus Torres* y *M.Ángeles Pérez García*.

Trabajo de Fin de Grado.

*6 de junio de 2021*

# Agradecimientos

*Me gustaría agradecer a aquellos que han hecho posible la escritura de este artículo.*

*En primer lugar a mi familia, por haberme dedicado todo su tiempo, todo su esfuerzo y todos sus recursos con tal de educarme y formarme como persona.*

*En segundo, a mi pareja y amigos por haber estado a mi lado y darme apoyo y fuerzas en todo momento.*

*Por último, a la universidad y a mis profesores por haberme formado profesionalmente y concretamente a mis tutores por haberme guiado en la elaboración de este paper.*

## Resumen:

Los cálculos de las funciones de onda radiales de un potencial central son muy útiles en física atómica y nuclear, pero por desgracia resolverlos numéricamente para un potencial dado puede ser complejo. Nuestro objetivo será describir un algoritmo capaz de encontrar la solución numérica de las ecuaciones radiales de Dirac para un gran conjunto de potenciales centrales. Consideraremos aquellos en los que la función  $\nu(r) \equiv r \cdot V(r)$  es finita y alcanza valores constantes cuando  $r \rightarrow 0$  y  $r \rightarrow \infty$ . Incluyendo así potenciales finitos, campos de Coulomb y una combinación de estos con campos de corto alcance.

La función  $\nu(r)$  usada en los cálculos es el spline cúbico natural el cual interpola los valores proporcionados por el usuario. Las ecuaciones radiales se resuelven utilizando el método exacto de series de potencias de las funciones radiales, las cuales son sumadas hasta la precisión pedida con el fin de evitar el error de truncamiento. Se calcularán las funciones de onda radiales normalizadas, los autovalores y los estados ligados. Los errores cometidos se pueden hacer tan pequeños como se requiera especificando los valores del potencial en una red de puntos lo suficientemente densa. Podemos elegir diferentes niveles de precisión, compensándola con un mayor tiempo de ejecución (con doble precisión podemos obtener hasta 13 o 14 decimales).

## Abstract:

The solutions of radial wave functions in a confining potential are really useful in atomic and nuclear physics, but resolving them numerically for a given potential may be tough and complex. Our objective will be to describe an algorithm able of founding the numerical solution for Dirac radial equations for a large amount of central potentials. We will consider those in which the function  $\nu(r) \equiv r \cdot V(r)$  is finite and it reaches constant values when  $r \rightarrow 0$  and  $r \rightarrow \infty$ . Including this way finite potentials, Coulomb fields and a combination of these with short range fields.

The function  $\nu(r)$  used in calculations is the natural cubic spline, that interpolates the values provided by the user. The errors may be done as small as wanted specifying the potential values in a sufficient dense grid of points. The radial wave equations are solved by using exact power series expansions of the radial functions, which are summed up to the prescribed accuracy so that truncation errors can be completely avoided. Normalized radial wave functions, eigenvalues for bound states are evaluated. We can choose different levels of accuracy compensating it with a larger execution time (with double precision we are able to get 13 or 14 decimals).

**Palabras clave:** Ecuación de Dirac, funciones radiales, potencial central, estados ligados, splines, serie de potencias, cálculo numérico, autovalores, números cuánticos.

**Key words:** Dirac equation, radial functions, central potential, bound states, splines, power series, numerical solution, eigenvalues, quantum numbers.

# Índice general

Agradecimientos	I
Resumen	II
Índice	III
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Soluciones radiales para la ecuación de Schrödinger y Dirac.</b>	<b>2</b>
2.1. La ecuación de Schrödinger: . . . . .	5
2.2. La ecuación de Dirac . . . . .	7
<b>3. Solución de las ecuaciones radiales.</b>	<b>10</b>
3.1. La ecuación de Dirac y las series de potencias . . . . .	11
3.1.1. Caso $u_0 \neq 0$ . . . . .	13
3.1.2. Caso $u_0 = 0$ y $\sigma = -1$ . . . . .	13
3.1.3. Caso $u_0 = 0$ y $\sigma = -1$ . . . . .	14
<b>4. Estados ligados, autovalores.</b>	<b>15</b>
4.1. Ecuación de Dirac. . . . .	16
<b>5. Explicación del código: RADIAL</b>	<b>18</b>
<b>6. Potencial exponencial: <math>r \cdot V(r) = z + z_s \cdot e^{-Ar}</math></b>	<b>22</b>
6.1. Variación del potencial exponencial con el número cuántico principal $n$ . . . . .	24
6.2. Variación del potencial exponencial con el número cuántico $k$ . . . . .	26
6.3. Variación del potencial exponencial con la carga eléctrica $z$ . . . . .	28
<b>7. Potencial de Coulomb: <math>r \cdot V(r) = -1</math></b>	<b>32</b>
7.1. Variación del potencial de Coulomb con el número cuántico principal $n$ . . . . .	32
7.2. Variación del potencial de Coulomb con el número cuántico $k$ . . . . .	34
7.3. Variación del potencial de Coulomb con la carga eléctrica $z$ . . . . .	36
7.4. Variación de los autovalores con $k$ para distintos valores de $z$ . . . . .	39

<b>8. Potencial polinómico: <math>r \cdot V(r) = -1 - \frac{1}{10} \cdot r</math></b>	<b>41</b>
8.1. Variación del potencial polinómico con el número cuántico principal $n$ . . . . .	41
8.2. Variación del potencial polinómico con el número cuántico $k$ . . . . .	43
8.3. Variación del potencial polinómico con el parámetro $V_1$ del potencial . . . . .	45
8.4. Variación del potencial polinómico con el parámetro $V_2$ del potencial . . . . .	47
<b>9. Potencial polinómico: <math>r \cdot V(r) = V_1 + V_2 \cdot r + V_3 \cdot r^2 + V_4 \cdot r^4</math></b>	<b>50</b>
9.1. Variación del potencial polinómico con el número cuántico principal $n$ . . . . .	50
9.2. Variación del potencial polinómico con el número cuántico $k$ . . . . .	53
9.3. Variación del potencial polinómico con el parámetro del potencial $V_1$ . . . . .	54
9.4. Variación del potencial polinómico con el parámetro del potencial $V_2$ . . . . .	56
9.5. Variación del potencial polinómico con el parámetro del potencial $V_3$ . . . . .	58
9.6. Variación del potencial polinómico con el parámetro del potencial $V_4$ . . . . .	60
<b>Conclusiones</b>	<b>63</b>
<b>A. Instalación y ejecución del código “RADIAL”:</b>	<b>64</b>

# Capítulo 1

## Introducción

La existencia de un espectro no acotado de energías negativas constituye un problema serio para la teoría de Dirac. En particular, esto implica la inestabilidad de cualquier átomo, ya que, ante la interacción con el campo de radiación, un electrón tendría a su disposición un número infinito de estados con menor energía a los cuales transigir. Para solucionar este problema, Dirac propuso en 1930 una reinterpretación de la teoría que se conoce como "teoría de huecos". Según la cual, deberíamos poder observar la transformación de un fotón en un par de partículas de carga opuesta y también el proceso opuesto: un par de partículas de carga opuesta que se aniquilan con la consiguiente aparición de un fotón. Esta partícula de carga positiva, el positrón, fue observada en 1932 por Carl Anderson. Si aceptamos que la ecuación de Dirac describe el comportamiento de cualquier fermión, para cada partícula existirá una antipartícula. Esta fue la primera evidencia de la existencia de antimateria.

Las soluciones exactas de ecuaciones relativistas y no relativistas con un potencial central tienen gran importancia en mecánica cuántica. Por ejemplo, la solución exacta de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno y para el oscilador armónico son avances importantes desde los comienzos de la mecánica cuántica, los cuales nos proporcionan una fuerte evidencia a favor de la teoría. Cualquier solución exacta de un sistema cuántico es relevante para la física.

En este artículo trataremos de resolver numéricamente la ecuación de Dirac para una partícula en un potencial confinante, es decir, para estados ligados. Para ello, usaremos el código Radial, el cual es capaz de obtener la solución numérica de las ecuaciones radiales de Dirac para un gran conjunto de potenciales finitos, de Coulomb y una combinación de estos con campos de corto alcance. Se hará uso del spline cúbico natural para interpolar los valores y resolver las ecuaciones radiales mediante el método de series de potencias. Obtendremos y analizaremos como varían las autofunciones correspondientes normalizadas, los números cuánticos, los autovalores y los estados ligados para diferentes potenciales centrales.

## Capítulo 2

# Soluciones radiales para la ecuación de Schrödinger y Dirac.

Los operadores  $H$ ,  $L^2$  y  $L_z$  tienen asociados los siguientes valores propios o autovalores para un cierto armónico esférico  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ , donde  $l$  representa el número cuántico de momento angular orbital y  $m$  el número cuántico magnético.

$$HY_l^m(\theta, \varphi) = E_n Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (2.1)$$

$$L^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (2.2)$$

$$L_z Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar m Y_l^m(\theta, \varphi). \quad (2.3)$$

Añadiendo la coordenada radial, el conjunto de las autofunciones de los operadores  $H$ ,  $L^2$  y  $L_z$  son las soluciones de la ecuación de Schrödinger con la forma:

$$\psi_l^m(r, \theta, \varphi) = Y_l^m(\theta, \varphi) \chi_l(r), \quad (2.4)$$

donde  $\chi_l(r)$  es la solución de la ecuación radial

$$\left[ \frac{P_r^2}{2m_0} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_0 r^2} + V(r) - E \right] \chi_l(r) = 0, \quad (2.5)$$

en la cual, el término  $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_0 r^2}$  se refiere al término centrífugo.

Puesto que

$$P_r^2 \equiv -\hbar^2 \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r, \quad (2.6)$$

definimos

$$y_l = r \chi_l, \quad (2.7)$$

la condición hermítica para  $P_r$  exige que  $y_l(r=0) = 0$ .

Tenemos por lo tanto multiplicando por  $r$

$$\left[ \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_0 r^2} + V(r) - E \right] y_l(r) = 0, \quad (2.8)$$

con

$$\langle \psi_l^m | \psi_l^m \rangle = \int_0^\infty r^2 dr |\chi_l(r)|^2 = \int_0^\infty |y_l(r)|^2 dr. \quad (2.9)$$

En consecuencia, estamos en una situación similar al de una partícula de masa  $m$  entre comprendida entre  $0$  e  $\infty$  para una dimensión espacial.

En primer lugar, vemos como se comporta  $y_l$  cerca del origen. Asumimos que  $V(r)$  tiene en  $r=0$  como mucho una singularidad del tipo  $1/r$ . Esto se da en potenciales como el potencial de Coulomb o el de Yukawa. En estos casos el comportamiento de  $y_l$  está dominado por el término centrífugo y por lo tanto la función tiene una solución regular allí, la cual se comporta como  $r^{l+1}(1+O(r))$  al aproximarse  $r=0$ . La ecuación tiene también una solución irregular la cual va como  $1/r^l$  en este mismo caso. Para comprobar este comportamiento tomamos:

$$y_l(r) = r^s(1 + a_1 r + a_2 r^2 + \dots), \quad (2.10)$$

sustituyéndola en la ec. 2.8, haciendo el coeficiente  $1/r^2 = 0$ , obtenemos la conocida como *ecuación inicial*.

$$-s(s-1) + l(l+1) = 0, \quad (2.11)$$

La ecuación irregular debe ser rechazada puesto que no satisface  $y_l(0) = 0$  ni tampoco la normalización.

Para un átomo hidrogenoide con  $V(r) = -e^2/r$ , la función de onda del movimiento relativo es la solución  $\psi(r)$  de la ecuación:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{e^2}{r} \right] \psi(r) = E\psi(r), \quad m_0 = \frac{m_e M_p}{M_e + M_p}, \quad (2.12)$$

donde  $m_e$  es la masa del electrón en reposo y  $M_p$  es la masa del protón en reposo.

Con

$$\psi(r) = Y_l^m(\theta, \varphi) \frac{y_l(r)}{r}, \quad (2.13)$$

y

$$y_l'' + \left[ \epsilon + \frac{2m_0}{\hbar^2} \frac{e^2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] y_l = 0, \quad (2.14)$$

donde

$$\epsilon = \frac{2m_0 E}{\hbar^2},$$



4CAPÍTULO 2. SOLUCIONES RADIALES PARA LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER Y DIRAC.

definiendo

$$k \equiv (-\epsilon)^{1/2} = \frac{(-2m_0E)^{1/2}}{\hbar}, \quad (2.15)$$

Para  $E > 0$  la solución es una combinación lineal de senos y cosenos, como en el caso de la partícula libre la cual oscila en la región  $r \rightarrow \infty$ , para valores de  $E < 0$  decrece exponencialmente, puesto que se ve afectada por el potencial quedando confinada. Siendo los puntos de retorno aquellos donde la velocidad de la partícula es nula.

Tomamos

$$x = 2kr,$$

definimos el radio de Bohr como

$$a = \frac{(4\pi\epsilon_0)\hbar^2}{m_0e^2} = 0,529 \times 10^{-10}m,$$

y también

$$\nu = \frac{1}{ka} = \frac{m_0e^2}{\hbar} \left( -\frac{1}{2m_0E} \right)^{1/2} = \frac{e^2}{\hbar c} \left( -\frac{m_0c^2}{2E} \right)^{1/2}. \quad (2.16)$$

Con estas substituciones podemos escribir la ecuación finalmente como:

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} - \frac{l(l+1)}{x^2} + \frac{\nu}{x} - \frac{1}{4} \right] y_l = 0. \quad (2.17)$$

Vemos que para  $x \rightarrow \infty$  hay una solución que se comporta como  $e^{-x/2}$  por lo que tomamos:

$$y_l = x^{l+1} e^{-x/2} v_l(x), \quad (2.18)$$

Con esto separamos el comportamiento en el origen y en el infinito, pero todavía nos falta determinar  $v_l(x)$  para determinar la solución completa. Usando esta autofunción obtenemos:

$$\left[ x \frac{d^2}{dx^2} + (2l+2-x) \frac{d}{dx} - (l+1-\nu) \right] v_l(x) = 0, \quad (2.19)$$

la cual tiene la forma de una ecuación hipergeométrica. Utilizando la solución de este tipo de ecuaciones podemos obtener el espectro de energía para estados discretos con momento angular  $l$ .

$$E_n = - \left( \frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 \frac{m_0c^2}{2n^2}. \quad (2.20)$$

Donde cabe recalcar que el número cuántico magnético  $m$  no juega ningún papel, y que para cada valor de energía  $E_n$ , el número cuántico orbital  $l$  puede tomar valores desde 0 hasta  $n$  por lo que el estado  $E_n$  está  $n^2$  veces degenerado.

Se puede profundizar más al respecto en el libro [1] de la bibliografía.

## 2.1. La ecuación de Schrödinger:

En mecánica cuántica no relativista, los estados estacionarios de una partícula en un potencial central  $V(r)$  están descritos por la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo,

$$H_S \psi(r) = E \psi(r), \quad (2.21)$$

con el hamiltoniano

$$H_S = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2M} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{r^2} L^2 \right) + V(r), \quad (2.22)$$

donde  $M$  es la masa de la partícula y  $\hbar$  es la constante de Planck. Puesto que el operador de momento angular orbital (en unidades de  $\hbar$ )  $L = (1/\hbar)r \times p$  conmuta con  $H_S$ , podemos construir autovectores de  $H_S$ ,  $L^2$  y  $L_z$ . Estas soluciones de la ecuación de Schrödinger son de la forma

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{r} P(r) Y_{l,m}(\vec{r}, \theta, \varphi), \quad (2.23)$$

donde los armónicos esféricos  $Y_{l,m}(\vec{r})$  son autofunciones de  $L^2$  y  $L_z$  con autovalores  $l(l+1)$  y  $m$  respectivamente. Además, la función radial reducida  $P(r)$  satisface la ecuación radial

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2 P}{dr^2} + \left[ \frac{\hbar^2}{2M} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) \right] P = EP \quad (2.24)$$

Puesto que  $r \cdot V(r)$  es finita en todas partes, podemos estar seguros de que la función de onda  $\psi(r)$ . Esto obliga a la ecuación radial  $P(r)$  a comportarse como  $r^{l+1}$  cerca del origen. Cuando  $V(r)$  toma valores negativos en una cierta región, pueden existir estados ligados en los cuales la partícula se moverá en un volumen limitado para unos autovalores negativos concretos, en estos casos son en los que profundizaremos.

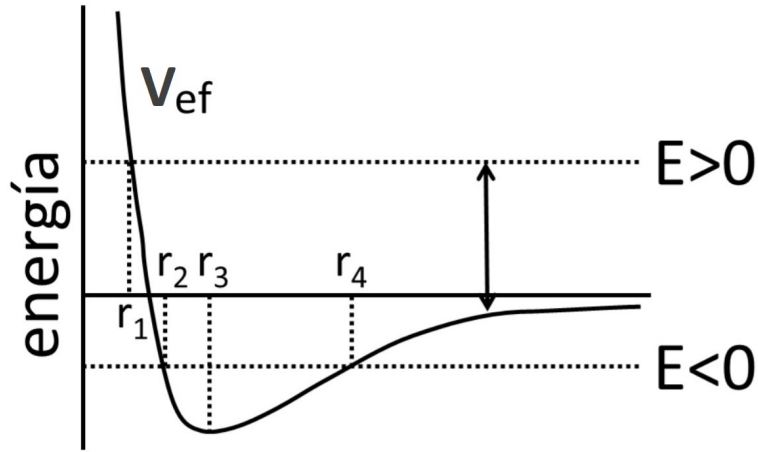


Figura 2.1: Representación de la energía frente al radio para un potencial efectivo ( $V_{eff}$ ). Se puede ver como para valores de la energía mayores que 0 la partícula tendría un único punto de retorno ( $r_1$ ) y por tanto sería una partícula libre, en cambio para valores de energía negativos vemos como la partícula estaría confinada entre  $r_2$  y  $r_4$ . Además, podemos ver el mínimo del potencial, el punto  $r_3$ .

Los estados discretos de energía pueden ser definidos por el número de momento angular  $l$  y el número cuántico principal  $n$ . También podemos usar el número cuántico radial, definido como  $n_r = n - (l + 1)$  para identificar los niveles de energía negativa. Este número supone una ventaja puesto que representa el número de nodos de la función radial. Podemos definir el potencial efectivo como

$$V_{eff}(r) = \frac{\hbar^2}{2M} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r).$$

Los nodos de la función radial están localizados en la región permitida del movimiento. Los puntos de inflexión cumplen que  $d^2P/dr^2 = 0$  y son los nodos de  $P(r)$  en los puntos de retroceso del movimiento radial, caracterizados por  $V_{eff} = E$ . En la región clásicamente prohibida  $P(r)$  crece o decrece de forma monótona cuando  $r$  crece. Puesto que (2.24) no depende del número cuántico magnético,  $m$ , cada nivel de energía,  $E_{nl}$ , está al menos  $2l+1$  veces degenerado. Para estados ligados la función de onda se normaliza exigiendo

$$\int \psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r})dr = \int_0^\infty P^2(r)dr = 1. \quad (2.25)$$

Para estados libres ( $E > 0$ , espectro continuo) la función de onda se debe normalizar de forma asintótica, es decir

$$P(r) \sim \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} - \eta \ln(2kr) + \delta\right), \quad (2.26)$$

donde el número cuántico  $k$  se define como

$$k \equiv \frac{p}{\hbar} = \sqrt{2ME}/\hbar. \quad (2.27)$$

La constante  $\eta$  (vale 0 para campos de alcance finito) y  $\delta$  es el desfase.

## 2.2. La ecuación de Dirac

Los estados estacionarios de una partícula con espín 1/2 en el campo  $V(r)$  están descritos por la ecuación de Dirac.

$$H_D\psi(r) = (E + Mc^2)\psi(r). \quad (2.28)$$

Con el hamiltoniano

$$H_D = -i\hbar\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta Mc^2 + V(r), \quad (2.29)$$

donde  $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$  y  $\beta$  son matrices 4x4. En la representación de espínor

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix} \quad (2.30)$$

Donde  $\sigma$  son las matrices de espín de Pauli

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

e  $I_2$  es la matriz unidad 2x2. En esta representación,  $\psi(r)$  es una función de cuatro componentes. La cantidad  $E$  es la energía de la partícula excluyendo la energía en reposo  $Mc^2$ , en el límite no relativista ( $c \rightarrow \infty$ ), los autovalores  $E$  de la ecuación de Dirac tienden a los autovalores de la ecuación de Schrödinger.

El operador de momento angular  $J = L + S$ , donde  $L$  es el momento angular orbital y  $S = (1/2)\vec{\sigma}$  el operador de espín, conmuta con el Hamiltoniano de la Ecuación de Dirac.

El operador

$$K \equiv -\beta(\vec{\sigma} \cdot \vec{L} + 1) = \begin{pmatrix} -(J^2 - L^2 + \frac{1}{4})I_2 & 0 \\ 0 & (J^2 - L^2 + \frac{1}{4})I_2 \end{pmatrix}, \quad (2.32)$$

conmuta con  $H_D$ ,  $J^2$  y  $J_z$ . Por tanto como son un conjunto continuo de observables compatibles, podemos construir simultáneamente autofunciones de  $H_D$ ,  $J^2$ ,  $J_z$  y  $K$  con autovalores  $E + Mc^2$ ,  $j(j+1)$ ,  $m$  y  $K$  respectivamente.

8CAPÍTULO 2. SOLUCIONES RADIALES PARA LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER Y DIRAC.

Las soluciones de la ecuación de Dirac se pueden escribir como

$$\psi(r) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} iP(r)\Omega_{k,m}(\vec{r}) \\ Q(r)\Omega_{-k,m}(\vec{r}) \end{pmatrix}, \quad (2.33)$$

donde  $P(r)$  y  $Q(r)$  son las componentes superior e inferior de las funciones radiales y el espinor esférico.

$$\begin{aligned} \Omega_{k,m}(\vec{r}) \equiv \Omega_{j,m}^l(\vec{r}) &= \sum_{\mu=\pm 1/2} \langle l, 1/2, m - \mu, \mu | j, m \rangle Y_{l,m-\mu}(\vec{r}) X_{\mu} \\ &= \begin{pmatrix} \langle l, 1/2, m - 1/2, +1/2 | j, m \rangle Y_{l,m-1/2}(\vec{r}) \\ \langle l, 1/2, m + 1/2, -1/2 | j, m \rangle Y_{l,m+1/2}(\vec{r}) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.34)$$

son autofunciones simultáneamente de  $L^2$ ,  $S^2$ ,  $J^2$  y  $J_z$  con autovalores  $l(l+1)$ ,  $3/4$ ,  $j(j+1)$  y  $m$  respectivamente. Las cantidades  $\langle l, 1/2, m - \mu, \mu | j, m \rangle$  son coeficientes de Clebsch-Gordan y el espinor  $X_{\mu}$  son autofunciones de  $S^2$  y  $S_z$  con autovalores  $3/4$  y  $\mu = \pm 1/2$ . Los números cuánticos  $k$ ,  $j$  y  $l$  están relacionados por

$$\begin{aligned} k &= (l - j)(2j + 1) = -(j + 1/2)\sigma, & \sigma &\equiv -\text{sgn}(k) = -|k|/k \\ j &= |k| - 1/2 = l + \sigma/2, & l &= |k| - (1 + \sigma)/2 = j - \sigma/2 \end{aligned} \quad (2.35)$$

La función de onda relativista no es una autofunción de  $L^2$ , el índice  $l$  usado en notación espectroscópica es el autovalor de la componente superior del espinor y sirve para indicar la paridad de  $\psi(r)$ . Las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  satisfacen las ecuaciones

$$\frac{dP}{dr} = -\frac{k}{r}P - \frac{E - V + 2Mc^2}{c\hbar}Q, \quad \frac{dQ}{dr} = \frac{E - V}{c\hbar}P + \frac{k}{r}Q \quad (2.36)$$

Estas ecuaciones determinan las funciones de onda para estados con energía total ( $E + Mc^2 > 0$ ). Las ecuaciones de Dirac admiten autovalores negativos ( $E + Mc^2 < 0$ ), los cuales corresponden a estados de antipartículas. En el caso de una interacción electrostática, producida por el potencial escalar  $\phi(r)$ , los estados de un electrón ordinario están descritos por los orbitales (2.33), cuyas funciones son soluciones de las ecuaciones (2.36) donde  $V(r) = -e\phi(r)$ , donde  $e$  es el valor absoluto de la carga del electrón. Los estados de energía negativa representan los estados de positrones, los cuales son de la forma

$$\psi(r) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} Q(r)\Omega_{-k,-m}(\vec{r}) \\ -iP(r)\Omega_{k,-m}(\vec{r}) \end{pmatrix}, \quad (2.37)$$

donde las ecuaciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  satisfacen las ecuaciones (2.36) con la función potencial  $V(r) = e\phi(r)$ .

Como en la teoría no relativista, cuando  $V(r)$  toma valores negativos en una cierta región, pueden existir estados ligados para un conjunto de autovalores negativos. Los niveles de energía

discretos están ahora identificados por el número cuántico  $k$  y el número cuántico principal  $n$  o bien el número cuántico radial  $n_r$ . Cada estado ligado a su vez estará, al menos,  $2j + 1$  veces degenerado. La normalización para estados ligados será

$$\int \psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r})d\vec{r} = \int_0^\infty [P^2(r) + Q^2(r)]dr = 1. \quad (2.38)$$

Los estados libres ( $E > 0$ ) se normalizarán de una forma en la que la función de onda radial  $P(r)$  oscile con una amplitud unidad.

Cabe recalcar que en el límite  $E - V \ll 2Mc^2$  las ecuaciones radiales (2.36) se reducen a

$$Q = \frac{c\hbar}{2Mc^2} \left( -\frac{k}{r}P - \frac{dP}{dr} \right) \quad (2.39)$$

y

$$\frac{d^2P}{dr^2} = \left[ \frac{k(k+1)}{r^2} - \frac{2M}{\hbar^2}(E - V) \right] P. \quad (2.40)$$

La ecuación (2.39) que para un valor más pequeño de  $Q(r)$ , antes es despreciable en el límite no relativista ( $c \rightarrow \infty$ ). Puesto que  $k(k+1) = l(l+1)$ , entonces la ecuación (2.40) coincide con la ecuación de Schrödinger y en el límite no relativista, la componente  $P(r)$  se reduce a la función radial de Schrödinger.

## Capítulo 3

# Solución de las ecuaciones radiales.

En esta sección usaremos unidades atómicas generalizadas, en estas unidades la constante de Planck  $\hbar$ , el valor de la carga del electrón  $e$  y la masa de la partícula  $M$  se toman con valor unidad. Las unidades atómicas de energía y longitud son las siguientes  $E_0 = Me^4/\hbar^2$  y  $a_0 = \hbar^2/(Me^2)$  respectivamente. La velocidad de la luz toma un valor de  $c = 137,036$  es decir el inverso de la constante de estructura fina. En estas unidades la ecuación radial de Schrödinger se escribe

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 P}{dr^2} + \left[ V(r) + \frac{l(l+1)}{2r^2} \right] P = EP, \quad (3.1)$$

y las ecuaciones de Dirac

$$\frac{dP}{dr} = -\frac{k}{r}P - \frac{E - V + 2c^2}{c}Q, \quad \frac{dQ}{dr} = \frac{E - V}{c}P + \frac{k}{r}Q.$$

Asumiendo que los valores  $v_i \equiv r_i V(r_i)$  se han dispuesto en un mallado para  $r_i$ , la función  $v(r)$  se puede aproximar como un spline natural cúbico el cual interpola los valores de entrada.

$$v(r) = v_0^{(i)} + v_1^{(i)}r + v_2^{(i)}r^2 + v_3^{(i)}r^3 \quad (3.2)$$

donde  $r_i \leq r < r_{i+1}$  con derivadas primera y segunda continuas. Los campos con un número finito de discontinuidades se tratan usando splines diferentes en cada región continua. Las posiciones de las discontinuidades se especifican introduciendo los dos valores del potencial en el mismo punto. Lo único que se necesita en el espaciado de los puntos es que los errores introducidos en las interpolaciones deben ser pequeños y que el último punto del mallado  $r_{NV}$  se debe escoger de tal forma que el potencial haya llegado a su valor asintótico constante, por lo que no es necesario usar mallados uniformes.

### 3.1. La ecuación de Dirac y las series de potencias

Nuestro objetivo es determinar las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  entre  $r_a$  y  $r_b$  donde el campo es dado por la función  $v(r)$  según la ecuación (3.2), asumiendo que conocemos los valores de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  al inicio del intervalo (en  $r_a$ ).

Haciendo el cambio de variable

$$x \equiv \frac{(r - r_a)}{h}, \quad h \equiv r_b - r_a, \quad (3.3)$$

entonces podemos reescribir las ecuaciones como

$$\begin{aligned} (r_a + hx)P' - \sigma|k|hP - UhQ + 2c\hbar/(r_a + hx)Q &= 0, \\ (r_a + hx)Q' + \sigma|k|hQ + UhP &= 0. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Donde ahora  $P$  y  $Q$  son funciones de  $x$  y no de  $r$ , además definimos

$$\sigma = -\text{sgn}(k), \quad U(x) \equiv \frac{r[V(r) - E]}{c} = u_0 + u_1x + u_2x^2 + u_3x^3, \quad (3.5)$$

con los coeficientes

$$\begin{aligned} u_0 &= c^{-1}[v_0 + (v_1 - E)r_a + v_2r_a^2 + v_3r_a^3], \\ u_1 &= c^{-1}[(v_1 - E) + 2v_2r_a + 3v_3r_a^2]h, \\ u_2 &= c^{-1}[v_2 + 3v_3r_a]h^2, \\ u_3 &= c^{-1}v_3h^3. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Expandimos la función radial  $P(x)$  como una serie de potencias en  $x$

$$P(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n, \quad Q(x) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n \quad (3.7)$$

donde de acuerdo con la ecuación (3.4) encontramos la siguiente relación de recurrencia para los coeficientes  $a_n$  y  $b_n$ .

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{h}{nr_a} [-(n-1 - \sigma|k|)a_{n-1} + (u_0 - 2cr_a)b_{n-1} + (u_1 - 2ch)b_{n-2} + u_2b_{n-3} + u_3b_{n-4}], \\ b_n &= -\frac{h}{nr_a} [u_0a_{n-1} + (n-1 + \sigma|k|)b_{n-1} + u_1a_{n-2} + u_2a_{n-3} + u_3a_{n-4}]. \end{aligned} \quad (3.8)$$



Usando estas relaciones junto con las condiciones de contorno

$$a_0 = P(r_a), \quad b_0 = Q(r_a), \quad (3.9)$$

los coeficientes  $a_n$  y  $b_n$  quedan determinados completamente. Los valores de  $P(r)$  y  $Q(r)$  en el extremo del intervalo  $r_b$  ( $x = 1$ ) están dados por

$$P(r_b) = P(1), \quad Q(r_b) = Q(1). \quad (3.10)$$

En la evaluación numérica de  $P(1)$  y  $Q(1)$  adoptamos un criterio de convergencia, la sumatoria cesa cuando los últimos términos añadidos  $a_j$  y  $b_j$  satisfacen la condición

$$\max(|a_j|, |b_j|) < \epsilon \max\left(\left|\sum_{n=0}^j a_n\right|, \left|\sum_{n=0}^j b_n\right|\right), \quad (3.11)$$

y al mismo tiempo

$$\begin{aligned} &\max(|r_b P'(1) - \sigma|k|hP(1) - (U - 2cr_b)hQ(1)|, \\ &|r_b Q'(1) + \sigma|k|hQ(1) + (UhP(1))|) < \epsilon \max(|P(1)|, |Q(1)|). \end{aligned} \quad (3.12)$$

Para comprobar esta última condición es necesario sumar las series  $P'(1)$  y  $Q'(1)$ .

Necesitamos series de expansiones especiales para comenzar la solución en  $r_a = r_1 = 0$

Tomaremos

$$P(x) = x^s \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n, \quad Q(x) = x^{s+t} \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n. \quad (3.13)$$

Sustituyendo la ecuación (3.13) en la (3.4) obtenemos:

$$\begin{aligned} &(s + n - \sigma|k|a_n - u_0 b_{n-t} - (u_1 - 2ch)b_{n-t-1} - u_2 b_{n-t-2} - u_3 b_{n-t-3} = 0, \\ &(s + n + \sigma|k|b_{n-t} + u_0 a_n + u_1 a_{n-1} + u_2 a_{n-2} + u_3 a_{n-3} = 0, \end{aligned} \quad (3.14)$$

donde  $h = r_2$ .

Los parámetros  $s$  y  $t$  se pueden determinar a partir del valor de  $u_0$  y de la condición de regularidad en  $r = 0$ . Se destacan los siguientes casos.

**3.1.1. Caso  $u_0 \neq 0$ .**

Podemos tomar  $t = 0$ , entonces las ecuaciones (3.14) se simplifican a

$$\begin{aligned}(s - \sigma|k|)a_0 - u_0b_0 &= 0, \\ u_0a_0 + (s + \sigma|k|)b_0 &= 0.\end{aligned}\tag{3.15}$$

Las soluciones no triviales (aquellas donde  $a_0 \neq 0$ ,  $b_0 \neq 0$ ) existen solamente si el determinante desaparece, esto nos lleva a

$$s = [k^2 - u_0^2]^{1/2},\tag{3.16}$$

para condiciones regulares. Con esto las ecuaciones (3.14) nos dan la siguiente relación de recurrencia

$$\begin{aligned}n(2s + n)a_n &= u_0A_n + (s + n + \sigma|k|)B_n, \\ n(2s + n)b_n &= -(s + n - \sigma|k|)A_n + u_0B_n,\end{aligned}\tag{3.17}$$

con

$$\begin{aligned}A_n &= u_1a_{n-1} + u_2a_{n-2} + u_3a_{n-3}, \\ B_n &= (u_1 - 2ch)b_{n-1} + u_2b_{n-2} + u_3b_{n-3}.\end{aligned}\tag{3.18}$$

Junto con los valores

$$a_0 = 1, \quad b_0 = (s - \sigma|k|)/u_0,\tag{3.19}$$

es suficiente para determinar los coeficientes en las series de la ecuación (3.13).

**3.1.2. Caso  $u_0 = 0$  y  $\sigma = -1$ .**

Tomamos  $s = |k|$  y  $t = 1$  de las ecuaciones (3.14) obtenemos

$$\begin{aligned}na_n &= (u_1 - 2ch)b_{n-2} + u_2b_{n-3} + u_3b_{n-4}, \\ (2|k| + n + 1)b_n &= -u_1a_n - u_2a_{n-1} - u_3a_{n-2}\end{aligned}\tag{3.20}$$

Para comenzar las series utilizamos

$$a_0 = 1, \quad b_0 = -u_1a_0/(2|k| + 1).\tag{3.21}$$

**3.1.3. Caso  $u_0 = 0$  y  $\sigma = -1$ .**

Tomamos  $s = |k| + 1$  y  $t = -1$ . De las ecuaciones (3.14) obtenemos

$$(2|k| + n + 1)a_n = (u_1 - 2ch)b_n + u_2b_{n-1} + u_3b_{n-2}, \quad (3.22)$$

$$nb_n = -u_1a_{n-2} - u_2a_{n-3} - u_3a_{n-4}.$$

Las series se empiezan con

$$b_0 = 1, \quad a_0 = (u_1 - 2ch)/(2|k| + 1). \quad (3.23)$$

Las series ec.(3.13) se suman con el criterio de convergencia ec.(3.12).

Las funciones radiales en  $r_2$  se normalizan de tal forma que

$$P(r_2) = 1, \quad Q(r_2) = Q(1)/P(1). \quad (3.24)$$

Con el paquete *RADIAL* podemos resolver las ecuaciones radiales usando el método de series de potencias hasta una precisión seleccionada por el usuario fijada como dato de entrada (valor del parámetro  $\epsilon$ ). Este parámetro determina en gran medida el tiempo de cálculo, un valor más pequeño de  $\epsilon$  nos proporciona una mayor precisión a expensas de un tiempo de cálculo mayor.

Los valores de las funciones radiales son deducidos del mallado proporcionado por el usuario, el cual, puede ser diferente al mallado en el que se tabula la función potencial  $v(r)$ . El paquete *RADIAL* usa un mallado combinado, obtenido de fusionar estos dos mallados. Los puntos del mallado combinado se denotan como  $r_i$  desde ( $i = 1, \dots, NT$ ). Donde los puntos se distribuyen en orden estrictamente creciente ( $r_{i+1} - r_i > 0$ ) y además  $r_1 = 0$ . Para estados ligados, el valor de  $r_{NT}$  debe ser suficientemente grande para garantizar que la probabilidad de encontrar la partícula en un punto más alejado que  $r_{NT}$  es totalmente despreciable (muy importante para estados ligados altamente excitados). Cabe destacar que la precisión de las funciones de onda obtenidas es independiente del espaciado del mallado proporcionado por el usuario (excepto para estados ligados con muchos nodos)

La función de onda en cada intervalo (entre  $r_i$  y  $r_{i+1}$ ) está dada por la correspondiente expansión de series, en la práctica, puede ser interesante dividir este intervalo en subintervalos con el fin de acelerar la convergencia de las series. (En *RADIAL* la convergencia se consigue con menos de 60 términos). Sin embargo, solo los valores de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  en los puntos del mallado proporcionado por el usuario son transferidos al programa.

Debido a la renormalización de las funciones de onda en el segundo punto del mallado ( $r_2$ ), las funciones de onda radiales procesadas pueden tomar valores demasiado altos (pudiendo causar desbordamiento). Con el fin de prevenir esto, cada vez que el valor absoluto de  $P(r_i)$  sobrepasa 100, el valor calculado de la función radial es reescalado dividiéndolo por el valor absoluto ( $|P(r_i)|$ ), pero el valor de salida de las funciones radiales está correctamente normalizado.

## Capítulo 4

# Estados ligados, autovalores.

Buscamos encontrar la energía ( $E < 0$ ) y las funciones radiales a partir de número cuánticos específicos para estados ligados. Los autovalores pertenecen al intervalo ( $E_{inf}$ ,  $E_{sup}$ ) dado por

$$E_{inf} \simeq \min \left( V(r) + \frac{l(l+1)}{2r^2} \right) \quad (4.1)$$

y

$$E_{sup} \equiv \min \left( V(r_{NT} + \frac{l(l+1)}{2r_{NT}^2}, 0) \right). \quad (4.2)$$

Donde  $E_{inf}$  es el valor mínimo del potencial radial efectivo, el cual, es obligatoriamente el límite inferior para la ecuación de Schrödinger mientras que es solamente una aproximación en el caso de la ecuación de Dirac (no importa el valor exacto, nos vale con un valor aproximado de este). El límite superior se fija por razones computacionales y no físicas.

Para una energía dada  $E$  en el intervalo permitido, la solución numérica comienza en  $r = 0$  y extendida hacia afuera usando el método de series de potencias hasta un cierto punto del mallado  $r_m$ , más allá del punto de retroceso. Este punto es determinado con la condición

$$V(r_i) > E - \frac{l(l+1)}{2r_i^2}, \quad i \geq m. \quad (4.3)$$

El primer paso en la solución es encontrar el valor de la energía  $E$  para la cual la solución exterior (de 0 a  $r_m$ ) tiene el número correcto de ceros dados por el número cuántico radial  $n_r = n - (l + 1)$ , siendo  $n$  el número cuántico principal.

Esto se consigue usando reiteradamente la bipartición del intervalo. Cabe recalcar que el número de ceros de  $P(r)$  está determinado por sus valores en los puntos del mallado, por lo cual es necesario usar un mallado lo suficientemente denso para asegurar que como mucho hay un solo 0 entre puntos consecutivos del mallado (de otro modo el programa probablemente nos pedirá un mallado más denso).

Una vez conocemos un valor de la energía el cual nos proporciona el número de ceros que buscamos, procedemos a calcular la solución empezando desde  $r_{NT}$  (o un punto suficientemente

lejos de  $r_m$ ) y extendiéndolo hacia dentro de  $r_m$ . La solución interna se normaliza entonces de tal modo que  $P(r)$  es continua en el punto de unión ( $P_{in}(r_m) = P_{out}(r_m)$ ). Sucesivas correcciones de  $\Delta E$  del autovalor son calculadas en la discontinuidad de  $P'(r)$  o de  $Q(r)$  en  $r_m$  usando el método descrito por Mayers en 1957.

## 4.1. Ecuación de Dirac.

Para la solución interna utilizamos la aproximación WKB, la cual se espera que sea muy precisa para  $r \rightarrow \infty$ . Para radios suficientemente grandes, la energía potencial  $V(r)$  se hace infinitamente pequeña en comparación con  $E + 2c^2$ , y las ecuaciones

$$\frac{dP}{dr} = -\frac{k}{r}P - \frac{E - V + 2c^2}{c}Q, \quad \frac{dQ}{dr} = \frac{E - V}{c}P + \frac{k}{r}Q, \quad (4.4)$$

se pueden combinar. Obteniéndose así la siguiente ecuación diferencial para la componente  $P$

$$P''(r) - \mu(r)P(r) = 0, \quad (4.5)$$

donde

$$\mu(r) \equiv \left[ \frac{E + 2c^2}{c^2}(V(r) - E) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right]^{1/2}. \quad (4.6)$$

La solución interior comienza en el punto  $r_\infty (\gg r_m)$ , donde tomamos  $P(r_m) = 1$  y usamos la ecuación

$$\frac{P'(r)}{P(r)} = -\frac{1}{2}\mu'\mu^{-1} - \mu, \quad (4.7)$$

para aproximar  $P'(r_\infty)$  y extenderla hacia dentro usando el método de series de potencias. El punto  $r_\infty$  se determina como el punto mínimo del mallado que satisface la condición

$$r_\infty\mu(r_\infty) > 75, \quad (4.8)$$

la cual nos asegura que  $P(r_\infty) \ll P(r_m)$ . El error introducido por la aproximación WKB no se propaga hacia el punto de unión, la solución interna es estable. Cuando  $r_{NT}\mu(r_{NT}) < 75$  tomamos  $r_\infty = r_{NT}$ . Para valores de  $r$  mayores que  $r_\infty$ , entonces  $P(r) = 0$ . Recalcar que el último punto del mallado  $r_{NT}$  debe ser mayor que  $r_\infty$  o al menos estar lo suficientemente lejos de  $r_m$  como para que el error en la solución interior originado por la fórmula WKB (4.7) desaparezca en el punto de unión.

La solución interior comienza en  $r_\infty$  usando la primera ecuación de Dirac (4.4) y la ecuación (4.7), las cuales nos llevan a

$$\frac{Q(r)}{P(r)} \simeq -\frac{c}{E + 2c^2} \left( \frac{k}{r} + \frac{P'(r)}{P(r)} \right) = -\frac{c}{E + 2c^2} \left( \frac{k}{r} - \frac{1}{2}\mu'\mu^{-1} - \mu \right). \quad (4.9)$$

La fórmula para la corrección de los autovalores se puede obtener usando

$$P' = Q, \quad Q' = 2 \left[ V(r) - E + \frac{l(l+1)}{2r^2} \right] P. \quad (4.10)$$

Que provienen de la ecuación de Schrödinger donde  $P$  y  $Q$  dependen de  $r$  y  $E$ . De aquí deducimos que

$$\frac{d}{dr} \left[ P^2 \frac{d}{dE} \left( \frac{Q}{P} \right) \right] = -2P^2, \quad (4.11)$$

integrando esta ecuación en un intervalo arbitrario  $(r_a, r_b)$  obtenemos

$$\left[ P^2 \frac{d}{dE} \left( \frac{Q}{P} \right) \right]_{r_a}^{r_b} = -2 \int_{r_a}^{r_b} P^2(r) dr. \quad (4.12)$$

Asumiendo que la solución interna ha sido normalizada para coincidir con la externa en el punto de unión ( $P_{out} = P_{in} \equiv P(r_m)$ ) y que la función  $P(r)$  ha sido normalizada a la unidad obtenemos en el intervalo  $(E, E_{nl} = E + \Delta E)$  la corrección al autovalor en el caso de Schrödinger

$$\Delta E = P(r_m)[Q_{out}(r_m) - Q_{in}(r_m)] \left( 2 \int_0^\infty P^2(r) dr \right)^{-1} \quad (4.13)$$

En el caso de Dirac utilizado el lado izquierdo de la (4.11) y las ecuaciones (4.4), siguiendo los mismos pasos llegamos a la fórmula de la corrección del autovalor

$$\Delta E = cP(r_m)[Q_{in}(r_m) - Q_{out}(r_m)] \left( \int_0^\infty (P^2(r) + Q^2(r)) dr \right)^{-1}, \quad (4.14)$$

## Capítulo 5

# Explicación del código: RADIAL

Funcionamiento del código a partir de las subrutinas utilizadas.

(Línea 20:) Se lee la función potencial con la forma  $R \cdot V(r) = z + z_S \cdot e^{-AR}$ , se meten los parámetros solicitados  $z, z_S$  y  $A$ .

(Línea 26:) Se crea una red para el potencial (se llama a la subrutina *GRID*).

(Línea 47:) Se realiza la interpolación por splines y se llama a la subrutina *VINT* (las subrutinas se explicaran más adelante).

(Línea 50:) Se elige el tipo de ecuación que se quiere resolver, Schrödinger o Dirac y si es para un estado libre o ligado (nosotros nos centraremos en estados ligados para el caso de Dirac).

(Línea 105:) En este caso se piden al usuario los parámetros  $N, K$  y  $EPS$ , si estos no cumplen las condiciones esperadas entonces volvemos a elegir el tipo de ecuación a resolver. En caso de que sean correctos entonces llamamos a la subrutina *GRID* y a la subrutina *DBOUND* (depende de  $N, K$  y  $EPS$ ) y sacamos por pantalla los datos proporcionados, el estado ligado y la energía de ligadura. Se crea un fichero *WAVES.DAT* en el cual se muestran las funciones de onda.

(Línea 167:) Subrutina *GRID*: crea una red radial  $R(I)$  con  $I$  de 1 a  $N_P$ , la cual cumple que  $R(1) = 0$  y  $R(N_P) = R_N$  y además  $A \cdot R(I) + B \cdot Dlog(R(I)) - C = I$  con  $A = 1/paso$  y  $B = 1/Dlog \equiv$  (frecuencia). Donde el número de puntos ( $N_P$ ) debe ser mayor de 50 y menor que ( $N_{DIM}$ ) y además el paso y la frecuencia deben ser menores que unos valores máximos (en caso contrario devuelve un error).

(Línea 232:) Subrutina *ERRSPL*: estima el error introducido por la interpolación con splines cúbicos en una tabla  $(X(I), Y(I))$  con  $I$  desde 1 hasta  $N$ . El error interpolador en la cercanía de  $X(K)$  es aproximado por la diferencia entre  $Y(K)$  y el valor obtenido por el spline sin el punto  $K$ -ésimo. El error será el mayor de los errores relativos en la tabla.

(Línea 275:) Subrutina paquete *RADIAL*: resuelve las ecuaciones de Schrödinger y Dirac mediante splines cúbicos y series de potencias. Se asume que la función  $R \cdot V(R)$  es finita para todo  $R$  y que tiende a valores constantes cuando  $R$  tiende a 0 o a  $\infty$ .

Se utilizan unidades atómicas (Hartree), es decir las unidades para electrones y positrones pasan a ser en longitud el radio de Bohr ( $A_0 \equiv 5,3 \cdot 10^{-11}m$ ) y para la energía el Hartree

( $E_0 \equiv 27,21eV$ ). Para partículas de masa  $M$  (en unidades de la masa del electrón) las unidades correspondientes son longitud  $A_0/M$  y para energía  $ME_0$ .

La secuencia principal del programa RADIAL es:

(Línea 299:) Se llama a la subrutina *VINT*: rutina de iniciación, determina el spline cúbico que interpola la tabla de valores de la función  $R \cdot V(R)$  proporcionada por el usuario. Sus argumentos de entrada son:  $R(I) \equiv$  puntos del mallado para el potencial,  $R \cdot V(I)$  es  $R(I)$  veces la energía potencial en  $R = R(I)$ .  $N_V \equiv$  es el número de puntos en la tabla. El mallado debe incluir el origen ( $R = 0$ ) y extenderse hasta que la función  $R \cdot V(R)$  se hace constante asintóticamente. Los valores de entrada deben estar en orden no decreciente.

(Línea 481) Un punto extra se añade al mallado y  $R \cdot V(R)$  se iguala a  $R \cdot V(N_V)$  para valores de  $R$  mayores que  $R(N_V)$ .

(Línea 314:) subrutina *SBOUND* o *DBOUND*: resuelve las ecuaciones radiales para estados ligados. Los argumentos de entrada son: la energía de ligadura estimada ( $E$ ) (un valor aproximado cercano acelera los cálculos), la tolerancia global ( $EPS$ ), el error relativo permitido en las sumas de series de funciones radiales; tolerancia del valor esperado ( $DELL$ ) el error relativo del autovalor obtenido debe ser menor que  $DELL$  (un valor correcto es  $DELL = EPS$ ); el número cuántico principal ( $n$ ); el número cuántico de momento angular orbital ( $l$ ) y el número cuántico de momento angular relativista ( $k$ ). A la salida nos proporciona el valor correcto de la energía de ligadura ( $E$ ).

(Línea 783: *DBOUND*) Resuelve la Ecuación de Dirac para estados ligados (La que nos interesa) En caso de no cumplirse las condiciones específicas de los argumentos de entrada, nos devuelve un error. Se utiliza el número cuántico asociado al momento angular orbital y el número cuántico radial, se unen los mallados dado por el usuario y el del potencial y se coloca el mallado resultante en orden creciente, se busca el mínimo del potencial radial efectivo. Se tienen en cuenta tanto el exceso de nodos como la falta de estos para encontrar el número correcto de nodos a utilizar, se juntan las soluciones interiores y exteriores y se normaliza. Se corrige el autovalor, se normaliza de nuevo y se extrae el mallado final.

(Línea 333:) subrutina *SFREE* o *DFREE*: resuelve las ecuaciones radiales para estados ligados (No la desarrollaremos puesto que no entraremos a tratar estados libres)

Los valores de las funciones radiales se obtienen durante el bloque común (a los 4 tipos de ecuaciones que *RADIAL* es capaz de resolver). El mallado de puntos  $RAD(I)$  donde las funciones radiales están tabuladas puede ser seleccionado arbitrariamente por el usuario. EL mallado y el número de puntos del este debe ser definido antes de llamar a las subrutinas de solución. Los puntos radiales deben ordenarse en orden ascendente (de menor a mayor). Los resultados serán: el valor de la función radial ( $P(i)$ ) en el punto  $i$ -ésimo, el valor de la función radial ( $Q(i)$ ) en el punto  $i$ -ésimo para partículas de Shrodinger. Se define  $i_{last}$  para estados ligados ( $P(r)$  y  $Q(r)$  son 0 para valores de  $r$  mayores que  $RAD(i_{last}) \equiv$  Puntos de retorno, *IER* nos muestra un error en el código si *IER* es distinto de 0. Las funciones de onda de estados ligados están normalizadas a la unidad, la normalización adoptada para estados libres es aquella en la cual  $P(r)$  oscila con amplitud unidad en la región asintótica. El programa para automáticamente cuando los valores de entrada de los números cuánticos están fuera del rango.



(Línea 1510:) Subrutina *SOUTW*: Nos da la solución exterior de la ecuación de Schrödinger radial para un campo cúbico concreto mediante el método de serie de potencias.

(Línea 1562:) Subrutina *SINW*: Nos da la solución interna de la ecuación de Schrödinger radial para un campo cúbico concreto mediante el método de serie de potencias. Utiliza la solución WKB en el punto más externo del mallado y se renormaliza.

(Línea 1634:) Subrutina *DOUW*: Nos da la solución exterior de la ecuación de Dirac radial para un campo cúbico concreto mediante el método de serie de potencias.

(Línea 1686:) Subrutina *SINW*: Nos da la solución interna de la ecuación de Schrödinger radial para un campo cúbico concreto mediante el método de serie de potencias. Utiliza el número cuántico de momento angular orbital, la solución WKB en el punto más externo del mallado y se renormaliza.

(Línea 1767:) subrutina *SCH*: Resuelve la ecuación de Schrödinger radial para un campo central  $V(r)$  que cumple que  $r \cdot V(r) = r \cdot V_0 + r \cdot V_1 \cdot r + r \cdot V_2 \cdot r^2 + r \cdot V_3 \cdot r^3$ . Necesitamos las condiciones de contorno en  $R_A$ ; la solución en el intervalo entre  $R_A$  y  $R_B$  es generada usando una expansión de series de potencias para una partición del mismo, escogida adecuadamente de forma que se agilice la convergencia de las series. Los argumentos de entrada son  $E$  la energía cinética de la partícula,  $A_L$  el número cuántico relacionado al momento angular orbital y los parámetros del potencial  $r \cdot V_0$ ,  $r \cdot V_1$ ,  $r \cdot V_2$ ,  $r \cdot V_3$ . También se utilizan  $r_A$  y  $r_B$  para definir los extremos del intervalo,  $P_i$  y  $Q_i$  para definir la función radial y su derivada en  $r_A$  (entrada),  $P_f$  y  $Q_f$  para definir la función radial y su derivada en  $r_B$  (a la salida del intervalo),  $NSTEP$  para el número de pasos y  $NCHS$  para el número de ceros de  $P(r)$  en el intervalo.

(Línea 1856:) subrutina *SCH0*: Pone límite y chequea el desbordamiento en el caso de la subrutina *SCH*

(Línea 1970:) subrutina *DIR*: resuelve la ecuación de Dirac radial para un campo central  $V(r)$  que cumple que  $r \cdot V(r) = r \cdot V_0 + r \cdot V_1 \cdot r + r \cdot V_2 \cdot r^2 + r \cdot V_3 \cdot r^3$ . Necesita las condiciones de contorno en  $r_A$ , la solución en el intervalo entre  $r_A$  y  $r_B$  es generado usando una expansión de series de potencias para una partición del mismo, escogida adecuadamente de forma que se agilice la convergencia de las series. Los argumentos de entrada son  $E$  la energía cinética de la partícula,  $A_K$  el número cuántico relacionado al momento angular orbital y los parámetros del potencial  $r \cdot V_0$ ,  $r \cdot V_1$ ,  $r \cdot V_2$ ,  $r \cdot V_3$ . También se utilizan  $r_A$  y  $r_B$  para definir los extremos del intervalo,  $P_i$  y  $Q_i$  para definir la función radial y su derivada en  $r_A$  (entrada),  $P_f$  y  $Q_f$  para definir la función radial y su derivada en  $r_B$  (a la salida del intervalo),  $NSTEP$  para el número de pasos y  $NCHS$  para el número de ceros de  $P(r)$  en el intervalo, por último, se incluye una magnitud ( $EPS$ ) que nos estima el error global en  $P_f$  y  $Q_f$ .

(Línea 2061:) subrutina *DIR0*: Introduce la velocidad de la luz y el nivel de desbordamiento.

(Línea 2275:) subrutina *SCOUL*: Utiliza funciones de Coulomb y Bessel para resolver estados libres asociados a funciones de Schrödinger radiales.

(Línea 2370:) subrutina *DCOUL*: Utiliza funciones de Coulomb y Bessel para resolver estados libres asociados a funciones de Dirac radiales.

(Línea 2513:) subrutina *FCOUL*: Calcula las funciones de Coulomb para  $ETA$  real,  $r_{1amb}$  mayor que -1 y  $X$  mayor o del orden de  $XTRO$  (es decir el punto de retorno cuando  $r_{1amb} = 0$ ). El valor de salida de  $ERR = 1$  nos indicaría que la evaluación del algoritmo no es aplicable por ser  $X$  demasiado pequeño. Los argumentos de entrada son:  $ETA$  es el parámetro de Sommerfeld,  $r_{1amb}$  relacionado con el momento angular y  $X$ , nuestra variable, la cantidad

de números oscilatorios asociada a la distancia radial. En cuanto a los argumentos de salida consta de:  $F$  y  $F_p$  la función regular y su derivada,  $G$  y  $G_p$  la función irregular y su derivada,  $ERR$  la imprecisión relativa numérica (un valor del orden de  $10^{-N}$  nos indica una precisión para la función de  $N$  decimales, donde la precisión máxima para doble precisión es  $10^{-15}$  ).

(Línea 2790:) subrutina *SUM2F0*: Es la suma de series hipergeométricas asintóticas. Las contribuciones positivas y negativas a la parte real e imaginaria se suman de forma separada para obtener una estimación del error.

(Línea 2862:) subrutina *DELTA*C: Calcula la diferencia de fase por Coulomb (con módulo  $2\pi$ )

(Línea 2881:) subrutina *CLGAM*: Nos devuelve el logaritmo de la función Gamma para un argumento complejo.

(Línea 2935:) subrutina *BESJN*: Calcula la función esférica de Bessel de primer tipo y de segundo tipo (funciones esféricas de Neumann) para argumentos reales positivos. Los argumentos de entrada:  $J_y$  representa el tipo a resolver (1 para Bessel y 2 para Neumann),  $N$  orden hasta el cual se calcula (debe ser entero),  $X$ , el argumento, ha de ser real y positivo. Para argumentos pequeños y ordenes positivos se utiliza el método de series de potencias, para ordenes positivos y argumentos intermedios el método de Miller, la relación de recurrencia para argumentos mayores que el orden y para ordenes negativos.

(Línea 3069:) subrutina *SPLINE*: Hace la interpolación por splines entre los datos tabulados. Los argumentos de entrada son:  $X(i)$  un mallado de puntos en orden creciente,  $Y(i)$  los valores de la función para cada correspondiente valor del mallado,  $S_1$  y  $S_N$  las segundas derivadas en los puntos  $X(1)$  y  $X(N)$  (el spline natural corresponde a tomar  $S_1 = S_N = 0$ ),  $N$  el número de puntos del mallado. Con esto el polinomio interpolador en el intervalo  $i$ -ésimo de  $X(i)$  a  $X(i+1)$  es  $P_i(X) = A(i) + x(C(i) + X \cdot D(i))$ . A la salida obtenemos  $A(i)$ ,  $B(i)$ ,  $C(i)$ ,  $D(i)$ , es decir, los coeficientes del spline.

(Línea 3144:) subrutina *FINDI*: Encuentra el intervalo entre  $X(i)$  y  $X(i+1)$  en el que se encuentra el valor  $X_c$ , donde  $X_c$  es el punto que se busca localizar. Nos devuelve el índice del intervalo  $i$ .

(Línea 3176:) subrutina *INTEG*: Integra la función del spline cubico. Utiliza los coeficientes del spline y los límites superior e inferior entre los que realizar la integral  $X_u$  y  $X_l$  respectivamente y nos devuelve el valor de la integral *SUM*.

(Línea 3238:) subrutina *INTEG2*: Integra la función para un spline cúbico al cuadrado (funciona de igual forma que *INTEG*).

## Capítulo 6

### Potencial exponencial:

$$r \cdot V(r) = z + z_S \cdot e^{-Ar}$$

Nos centraremos ahora en obtener casos concretos para ver como varían las gráficas de  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente a  $r$  cuando modificamos los diferentes parámetros de entrada. Comentaremos como se modifican los parámetros de entrada en función de los de salida para la subrutina *DBOUND*, la que nos resuelve la ecuación de Dirac para estados ligados.

Destacar que las unidades usadas son las unidades de Hartree o unidades atómicas, es decir, las unidades para electrones y positrones pasan a ser en longitud el radio de Bohr ( $A_0 \equiv 5,3 \cdot 10^{-11}m$ ) y para la energía el Hartree ( $E_0 \equiv 27,21eV$ ). Para partículas de masa  $M$  (en unidades de la masa del electrón) las unidades correspondientes son longitud  $A_0/M$  y para energía  $ME_0$ .

En primer lugar presentaremos los dos ejemplos que nos ocupan propuestos por el artículo *RADIAL*, con ellos podremos tener una idea inicial de las funciones radiales.

Veamos el ejemplo para  $z = -1$ ,  $z_S = -50$ ,  $A = 5$ , siendo estos los parámetros del potencial. Además, introducimos como parámetros de entrada los números cuánticos  $n = 1$ ,  $k = -1$  y la precisión  $\epsilon = 10^{-13}$ .

Representando las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente a  $r$  obtenemos:

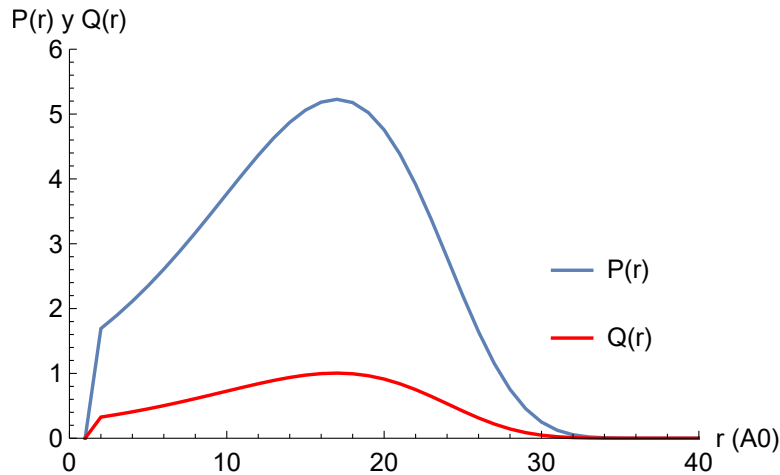


Figura 6.0.1: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para valores de la carga eléctrica  $\equiv z = -1$ , del número cuántico principal  $\equiv n = 1$  y del número cuántico  $\equiv k = -1$ .

Donde representamos  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo. Podemos apreciar como ninguna de las dos cortan el eje  $x$  (salvo en  $r = 0$  y  $r = \infty$ ), el cual nos indica el índice  $i$  para  $r(i)$ , por ello sabemos que el número radial es 0. Debido a  $n_r = n - (l + 1)$ , podemos estar seguros de que en este caso concreto  $l = 0$ , consistente con  $k = -1$ , puesto que  $k = \pm(l + 1)$  o bien  $k = \pm l$ . Como veremos comparando con resultados posteriores, decae relativamente rápido.

Si observamos el segundo caso propuesto ( $z = -1$ ,  $z_s = -50$ ,  $A = 5$ ,  $n = 10$ ,  $k = 5$ ,  $\epsilon = 10^{-13}$ ) :

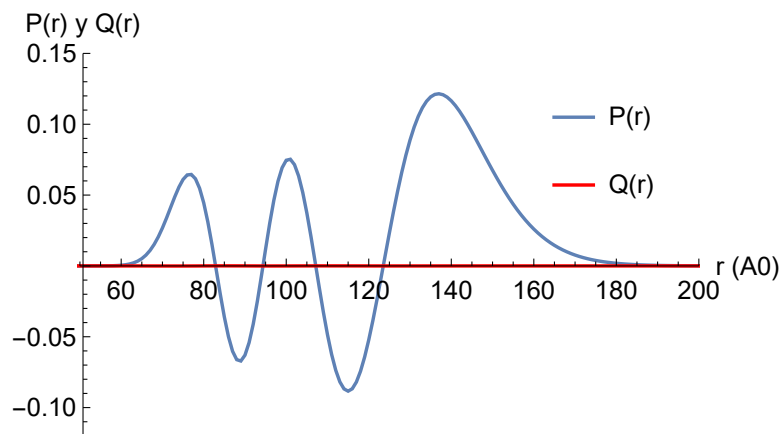


Figura 6.0.2: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para valores de la carga eléctrica  $\equiv z = -1$ , del número cuántico principal  $\equiv n = 10$  y del número cuántico  $\equiv k = 5$ .

Vemos como  $P(r)$  corta al eje 4 veces, de nuevo compatible con  $n_r = n - (l + 1)$  puesto que estaríamos en el caso  $l = k = 5$ .

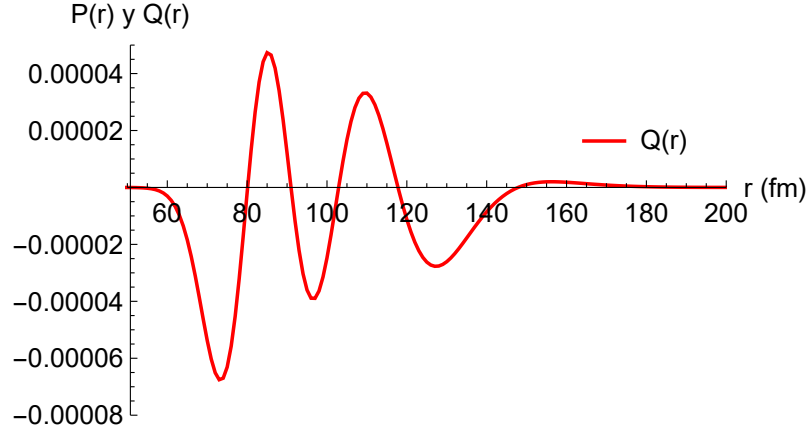


Figura 6.0.3: Representación de la función radial,  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para valores de la carga eléctrica  $\equiv z = -1$ , del número cuántico principal  $\equiv n = 1$  y del número cuántico  $\equiv k = 5$ .

Además, cabe destacar que  $Q(r)$  toma valores muy bajos en relación a  $P(r)$  a diferencia del caso anterior (entorno a un factor 4000 veces más pequeña), pero no es nula. También se observa como si volteamos  $Q(r)$  respecto de ambos ejes obtenemos prácticamente el mismo comportamiento que para  $P(r)$ .

## 6.1. Variación del potencial exponencial con el número cuántico principal $n$

Analizaremos ahora como varían las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  cuando modificamos el número cuántico principal  $n$ , para ello ejecutaremos varias veces el programa modificando únicamente este parámetro. Obtuvimos los siguientes resultados para valores de la carga eléctrica  $\equiv z = -1$  y del número cuántico  $\equiv k = -1$ .

6.1. VARIACIÓN DEL POTENCIAL EXPONENCIAL CON EL NÚMERO CUÁNTICO PRINCIPAL  $N=25$

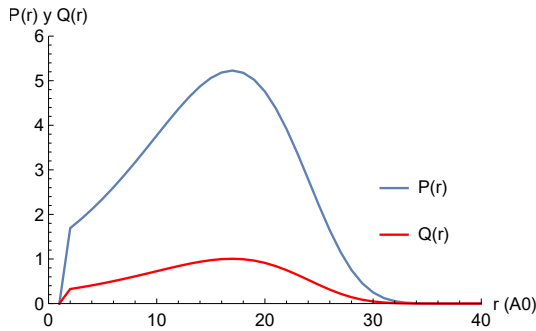


Figura 6.1.1: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor del número cuántico principal  $\equiv n = 1$ .

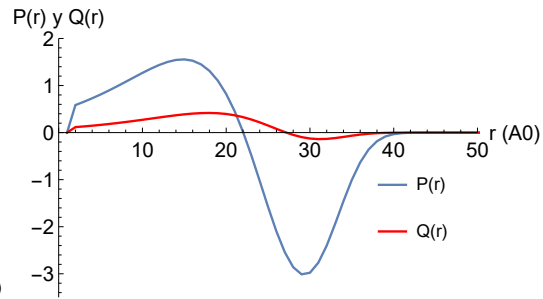


Figura 6.1.2: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor del número cuántico principal  $\equiv n = 2$ .

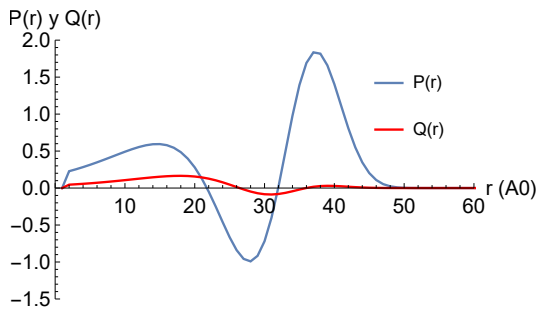


Figura 6.1.3: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor del número cuántico principal  $\equiv n = 3$ .

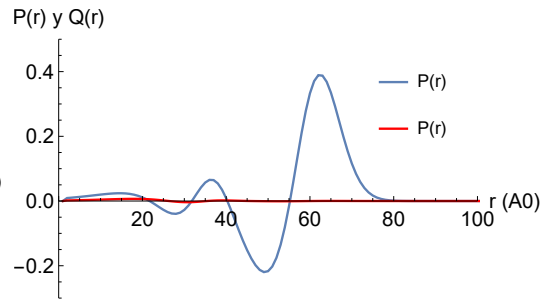


Figura 6.1.4: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor del número cuántico principal  $\equiv n = 5$ .

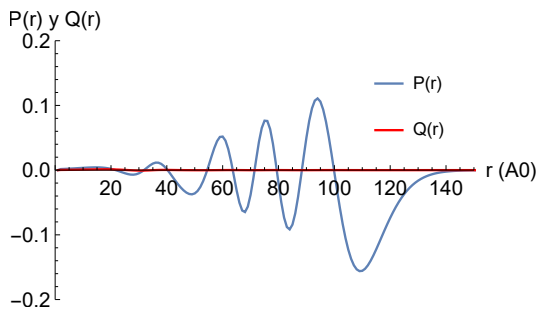


Figura 6.1.5: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor del número cuántico principal  $\equiv n = 10$ .

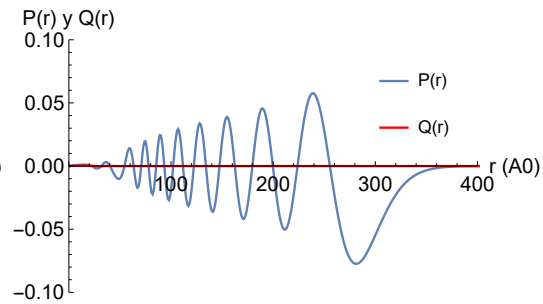


Figura 6.1.6: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor del número cuántico principal  $\equiv n = 20$ .

Vemos que en todos los casos se cumple  $n_r = n - (l + 1)$ , donde  $l = 0$  para  $k = -1$  y de este modo obtenemos tantos cortes con el eje como  $n_r = n - 1$ . Además, al aumentar  $n$  vemos como las funciones radiales tardan más en decaer, lo cual es lógico puesto se vuelven muy oscilantes para  $n$  grandes. Se observa como cuanto mayor es  $n$  los valores de  $Q(r)$  decrecen más rápidamente, llegando a tomar valores prácticamente despreciables.

Respecto a la energía de los estados ligados, autovalores obtenemos:

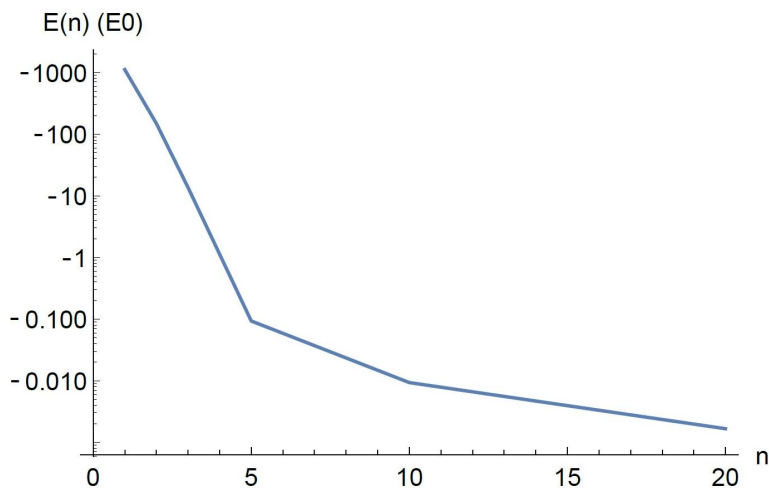


Figura 6.1.7: Representación de los autovalores de la energía,  $E(n)$ , frente al número cuántico principal,  $n$ , para valores de la carga eléctrica  $\equiv z = -1$  y del número cuántico  $\equiv k = -1$ .

Vemos como a medida que aumentamos el número cuántico principal,  $n$ , el autovalor,  $E(n)$ , correspondiente disminuye muy rápidamente en valor absoluto; es decir,  $E(n)$  y  $n$  serían inversamente proporcionales para el potencial escogido.

## 6.2. Variación del potencial exponencial con el número cuántico $k$

Estudiaremos ahora como varían  $P(r)$  y  $Q(r)$  cuando modificamos  $k$  y dejamos el resto de parámetros de entrada invariantes, en concreto tomaremos la carga eléctrica  $\equiv z = -1$  y el número cuántico principal  $\equiv n = 5$ .

Los gráficos obtenidos fueron:

6.2. VARIACIÓN DEL POTENCIAL EXPONENCIAL CON EL NÚMERO CUÁNTICO  $k=27$

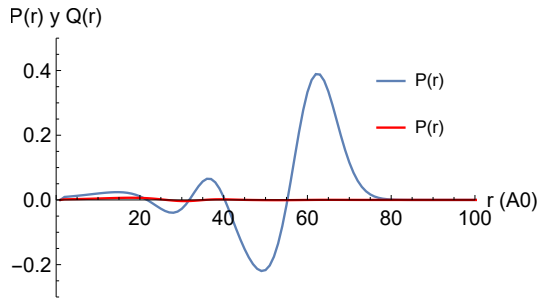


Figura 6.2.1: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor del número cuántico  $\equiv k = -1$ .

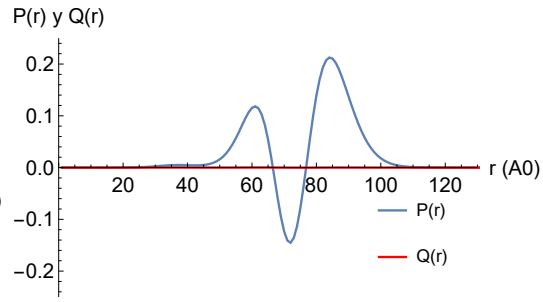


Figura 6.2.2: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor del número cuántico  $\equiv k = -3$ .

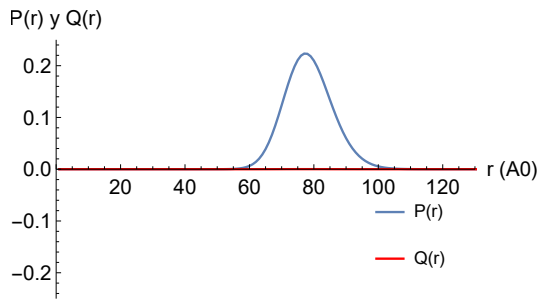


Figura 6.2.3: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor del número cuántico  $\equiv k = -5$ .

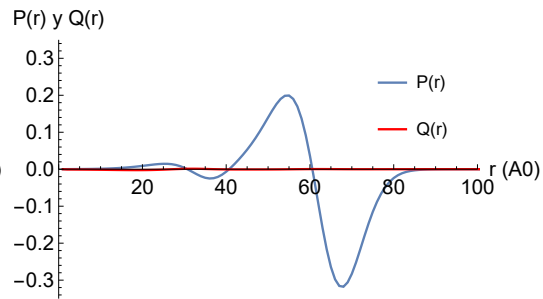


Figura 6.2.4: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor del número cuántico  $\equiv k = 1$ .

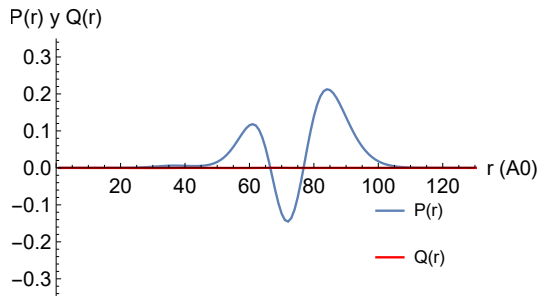


Figura 6.2.5: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor del número cuántico  $\equiv k = 2$ .

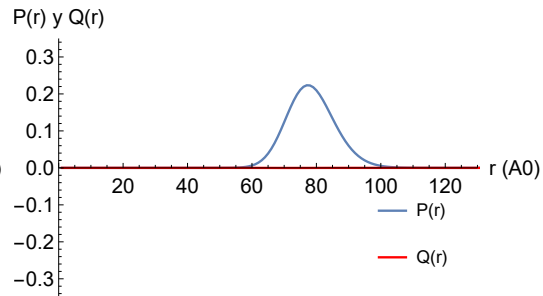


Figura 6.2.6: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor del número cuántico  $\equiv k = 4$ .



Podemos ver que el número de cortes con el eje varía aún sin cambiar  $n$ , esto se debe a que modificando  $K$  conseguimos variar  $l$ , como veíamos en los ejemplos, en concreto siendo  $l = \pm k$  o  $l = \pm(k + 1)$ . Debido a esto los casos como  $K = 4$  y  $K = -5$  son iguales, del mismo modo que para  $K = 2$  y  $K = -3$ .

La gráfica obtenida para la energía de los estados ligados es la siguiente:

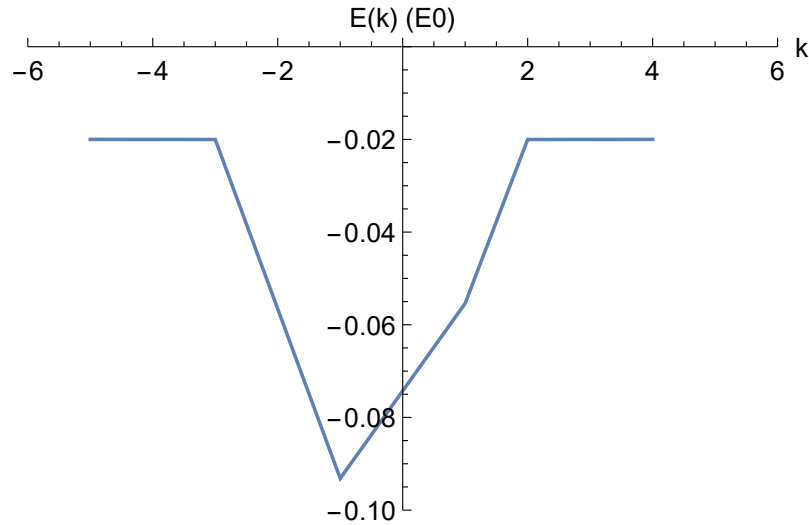


Figura 6.2.7: Representación de los autovalores de la energía,  $E(k)$ , frente al número cuántico,  $k$ , para valores de la carga eléctrica  $\equiv z = -1$  y del número cuántico principal  $\equiv n = 5$ .

Observamos como la energía toma valores máximos en valor absoluto cuando  $k$  toma valores muy pequeños en valor absoluto.

Si aumentamos en valor absoluto el valor de  $k$ , los autovalores correspondientes tienden a estabilizarse.

### 6.3. Variación del potencial exponencial con la carga eléctrica $z$

Estudiaremos ahora como varían  $P(r)$  y  $Q(r)$  cuando modificamos  $z$  y dejamos el resto de parámetros de entrada invariantes, en concreto para valores del número cuántico principal  $\equiv n = 5$  y para el número cuántico  $\equiv k = -1$ .

Los gráficos obtenidos son los siguientes:

6.3. VARIACIÓN DEL POTENCIAL EXPONENCIAL CON LA CARGA ELÉCTRICA Z29

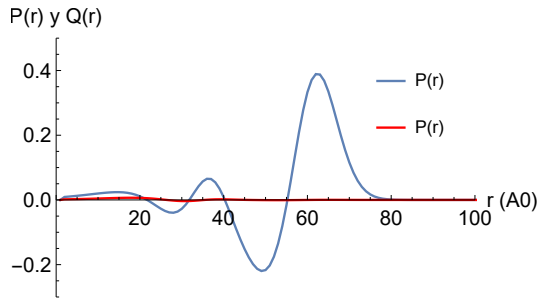


Figura 6.3.1: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor la carga eléctrica de  $\equiv z = -1$ .

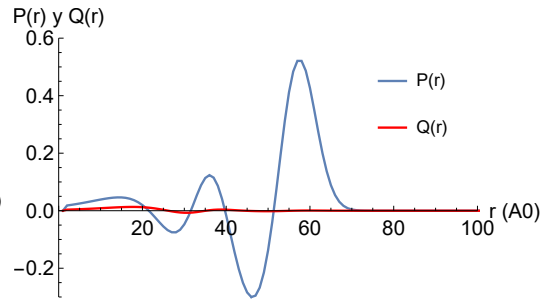


Figura 6.3.2: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor la carga eléctrica de  $\equiv z = -2$ .

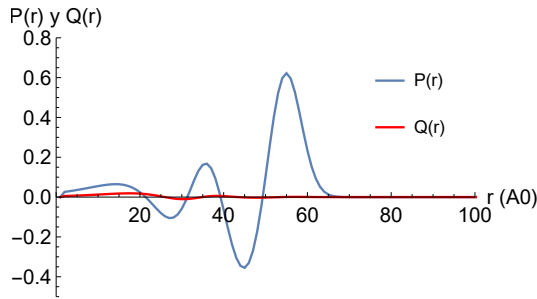


Figura 6.3.3: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor la carga eléctrica de  $\equiv z = -3$ .

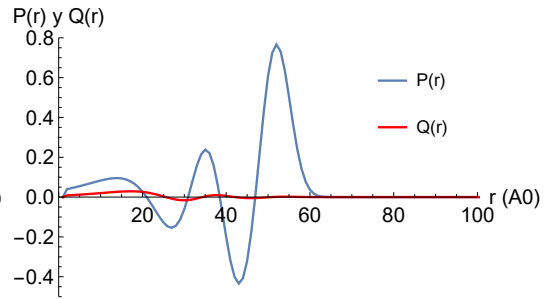


Figura 6.3.4: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor la carga eléctrica de  $\equiv z = -5$ .

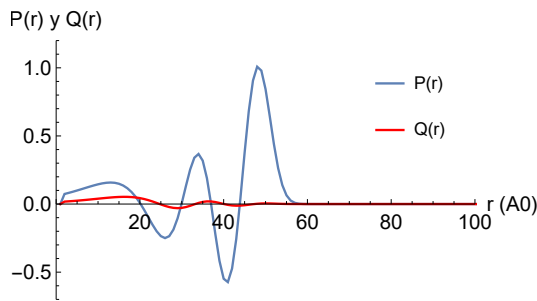


Figura 6.3.5: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor la carga eléctrica de  $\equiv z = -10$ .

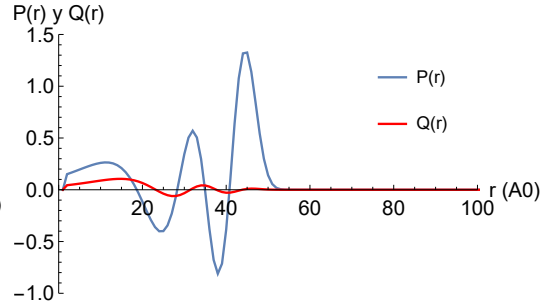


Figura 6.3.6: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor la carga eléctrica de  $\equiv z = -20$ .

Podemos ver como a medida que  $z$  aumenta en módulo, las funciones radiales decaen más rápidamente y en consecuencia puesto que siempre están normalizadas,  $P(r)$  y  $Q(r)$  toman en módulo valores cada vez mayores.

Cabe destacar que esto tiene sentido pues al aumentar la carga eléctrica la fuerza eléctrica ejercida sobre la partícula es mayor haciendo que le cueste más alejarse, En consecuencia, tenemos menor probabilidad de que la partícula se aleje, lo que produce que  $P(r)$  y  $Q(r)$  decaigan más rápidamente cuanto mayor es  $z$ .

Respecto a los autovalores:

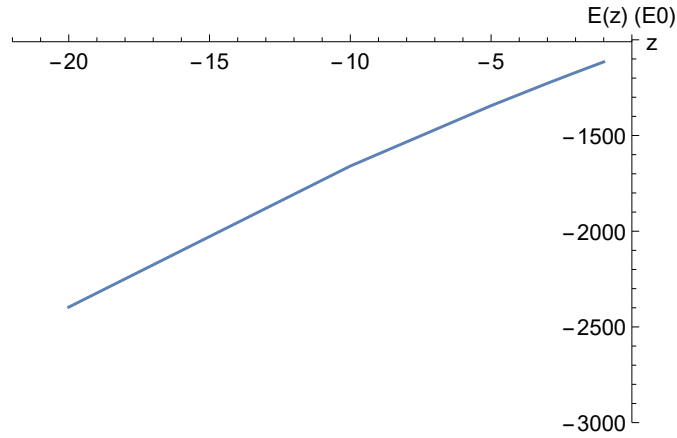


Figura 6.3.7: Representación de los autovalores de la energía,  $E(z)$ , frente a la carga eléctrica,  $z$ , para valores del número cuántico  $\equiv k = -1$  y del número cuántico principal  $\equiv n = 1$ .

Se observa como a medida que la carga eléctrica,  $z$ , es cada vez más negativa, los autovalores toman valores también cada vez más negativos, con una cierta linealidad.

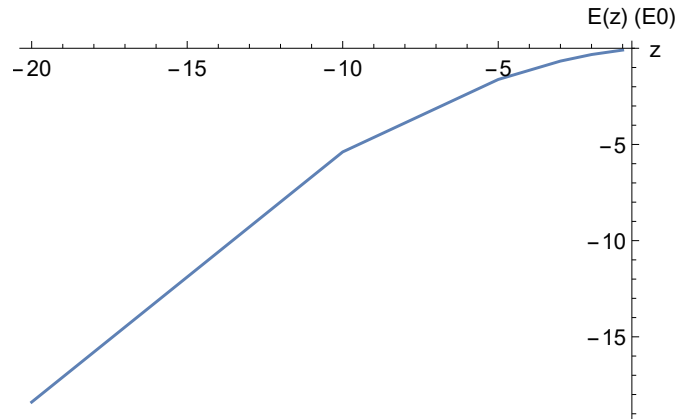


Figura 6.3.8: Representación de los autovalores de la energía,  $E(z)$ , frente a la carga eléctrica,  $z$ , para valores del número cuántico  $\equiv k = -1$  y del número cuántico principal  $\equiv n = 5$ .

### 6.3. VARIACIÓN DEL POTENCIAL EXPONENCIAL CON LA CARGA ELÉCTRICA Z31

Se observa como a medida que la carga eléctrica,  $z$ , es cada vez más negativa, los autovalores toman valores también cada vez más negativos. A medida que  $z$  es cada vez menor en valor absoluto vemos como tiende a valores más y más próximos a 0 para  $E(z)$ .

## Capítulo 7

# Potencial de Coulomb:

$$r \cdot V(r) = -1$$

Trataremos el caso concreto del potencial de Coulomb  $r \cdot V(r) = -1$  o  $V(r) = -\frac{1}{r}$ .

Estudiaremos como varían los autovalores ( $E$ ) y las funciones radiales ( $P(r)$  y  $Q(r)$ ) al modificar los valores de los números cuánticos  $n$  y  $k$ .

### 7.1. Variación del potencial de Coulomb con el número cuántico principal $n$

Las gráficas se han obtenido para número cuántico,  $k = -1$ , son las siguientes:

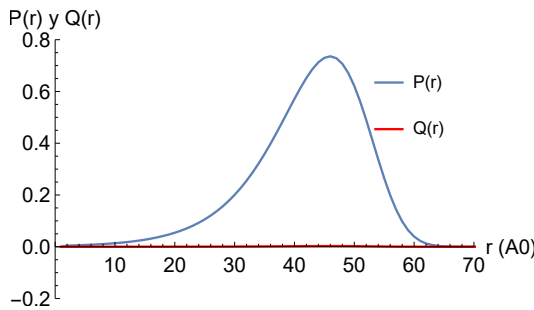


Figura 7.1.1: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor del número cuántico principal  $\equiv n = 1$ .

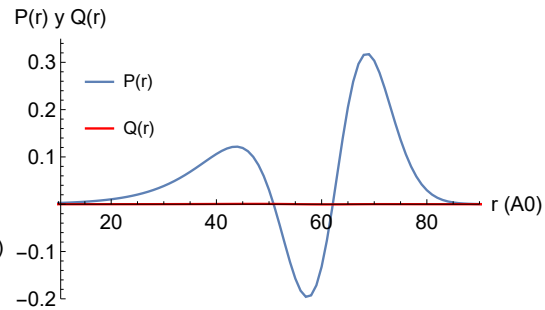


Figura 7.1.2: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor del número cuántico principal  $\equiv n = 3$ .

## 7.1. VARIACIÓN DEL POTENCIAL DE COULOMB CON EL NÚMERO CUÁNTICO PRINCIPAL $N_{33}$

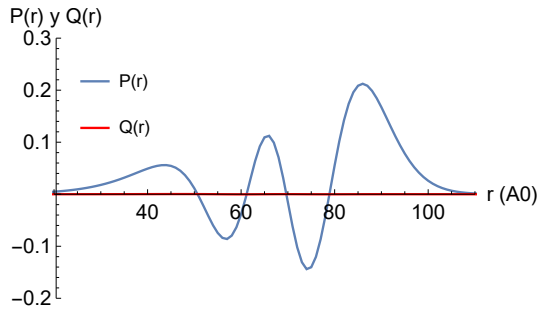


Figura 7.1.3: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor del número cuántico principal  $\equiv n = 5$ .

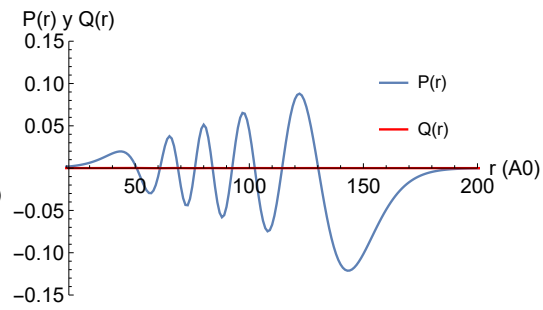


Figura 7.1.4: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor del número cuántico principal  $\equiv n = 10$ .

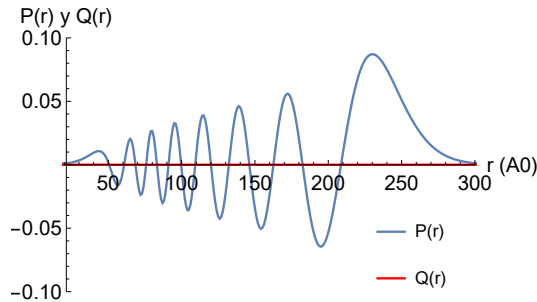


Figura 7.1.5: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor del número cuántico principal  $\equiv n = 15$ .

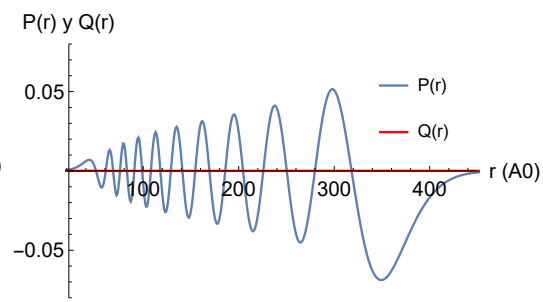


Figura 7.1.6: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor del número cuántico principal  $\equiv n = 20$ .

Podemos observar como el número cuántico principal  $n$  se corresponde con la suma del número de máximos y mínimos relativos, o con los cortes con el eje + 1 (sin contar los extremos hacia 0 o  $\infty$ ).

A su vez, nos damos cuenta de cómo a medida que aumenta el número cuántico principal  $n$ , las funciones de onda radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  toman cada vez valores más pequeños.

Respecto a la energía de ligadura:

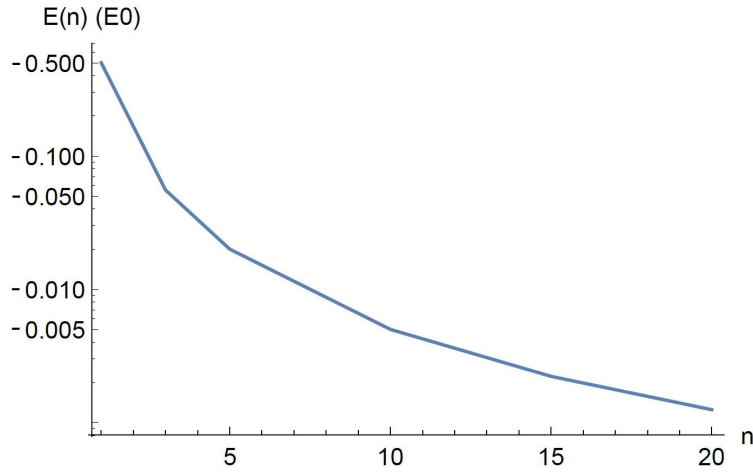


Figura 7.1.7: Representación de los autovalores de la energía,  $E(n)$ , frente al número cuántico principal  $n$ , para valores del número cuántico  $k = -1$  en el potencial de Coulomb  $r \cdot V(r) = -1$

Vemos como el valor de la energía de ligadura,  $E(n)$  desciende rápidamente en módulo a medida que el número cuántico principal,  $n$ , aumenta.

Para  $n = 1$ , se observa como tenemos un valor para la energía de

$$E_1 = -\frac{1}{2} \cdot E_0 = -13,6 \text{ eV}, \quad (7.1)$$

que corresponde con el valor del estado fundamental del átomo de hidrógeno.

Para valores mayores del número cuántico principal  $n$ , vemos como decae rápidamente con la forma

$$E_n = \frac{E_1}{n^2} = \frac{1}{2} \frac{E_0}{n^2}, \quad (7.2)$$

como corresponde a este caso.

## 7.2. Variación del potencial de Coulomb con el número cuántico $k$

Tomando el número cuántico principal el valor  $n = 5$ , se han obtenido las siguientes gráficas:

## 7.2. VARIACIÓN DEL POTENCIAL DE COULOMB CON EL NÚMERO CUÁNTICO $k$ 35

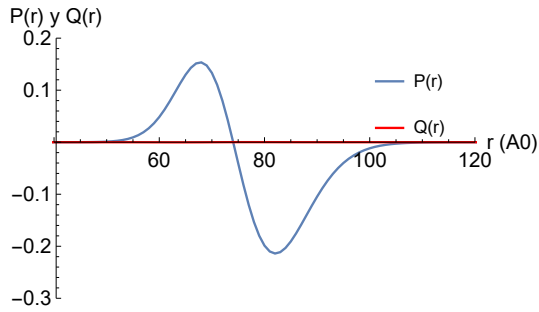


Figura 7.2.1: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor del número cuántico  $\equiv k = 3$ .

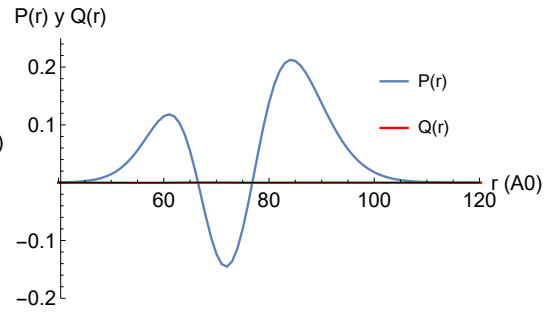


Figura 7.2.2: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor del número cuántico  $\equiv k = 2$ .

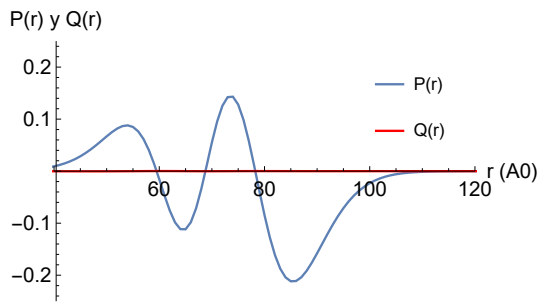


Figura 7.2.3: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor del número cuántico  $\equiv k = 1$ .

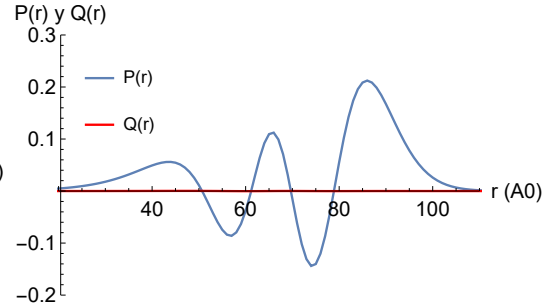


Figura 7.2.4: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor del número cuántico  $\equiv k = -1$ .

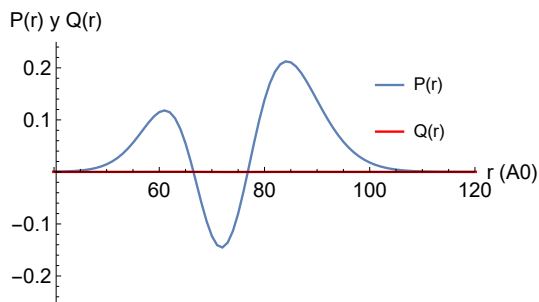


Figura 7.2.5: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor del número cuántico  $\equiv k = -3$ .

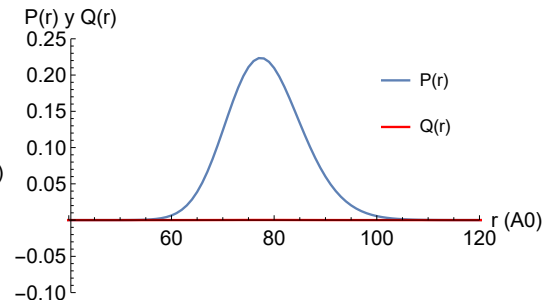


Figura 7.2.6: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor del número cuántico  $\equiv k = -5$ .



Se observa como para valores del número cuántico positivos,  $k > 0$ , la función de onda radial  $P(r)$  corta al eje  $n - k - 1$  veces, en cambio para valores del número cuántico negativos,  $k < 0$ ,  $P(r)$  corta al eje  $n + k$  veces, concordando así con lo que habíamos deducido teóricamente.

Aparte vemos como las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  toman valores del mismo orden de magnitud, aunque varíe el número cuántico  $k$ . Este hecho produce que no varíe la energía de ligadura con el número cuántico  $k$ , los autovalores son prácticamente independientes de  $k$ , como se observa en la siguiente imagen:

Para la energía de ligadura hemos obtenido la siguiente gráfica.

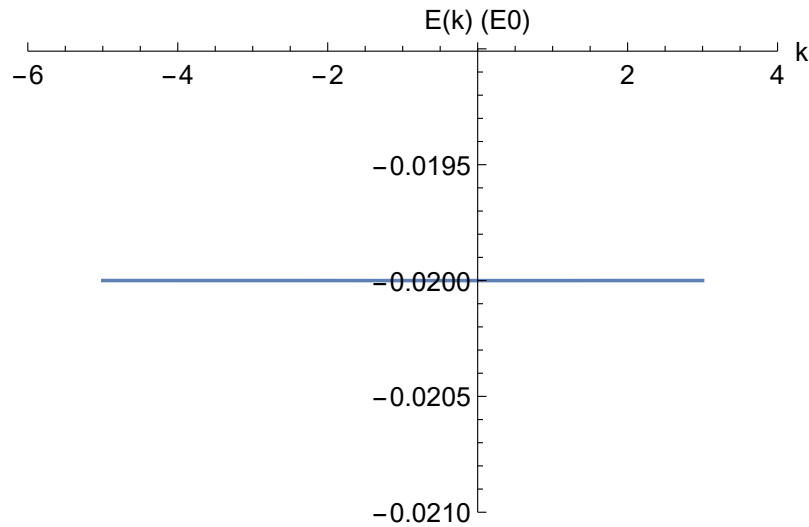


Figura 7.2.7: Representación de los autovalores de la energía,  $E(k)$ , frente al número cuántico  $k$ , para valores del número cuántico principal  $n = 5$  en el potencial de Coulomb  $r \cdot V(r) = -1$

Se observa cómo la energía de ligadura permanece invariante con  $k$ .

### 7.3. Variación del potencial de Coulomb con la carga eléctrica $z$

Estudiaremos ahora cómo se comporta la energía de ligadura  $E$  y las funciones radiales,  $P(r)$  y  $Q(r)$  cuando en el potencial de Coulomb cuando modificamos el valor de la carga eléctrica,  $z$ .

Hemos obtenido las siguientes gráficas para las funciones radiales, con el número cuántico principal,  $n = 1$  y el número cuántico  $k = -1$ .

7.3. VARIACIÓN DEL POTENCIAL DE COULOMB CON LA CARGA ELÉCTRICA Z37

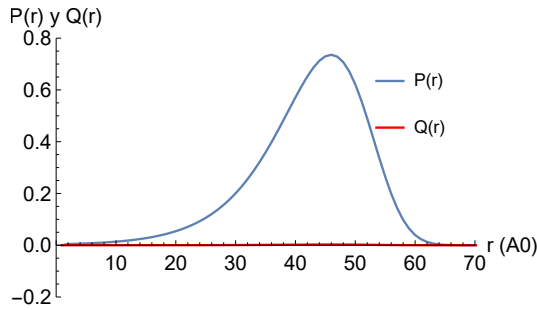


Figura 7.3.1: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor de la carga eléctrica  $\equiv z = -1$ .

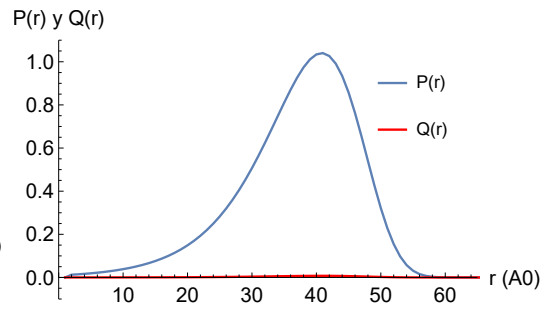


Figura 7.3.2: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor de la carga eléctrica  $\equiv z = -2$ .

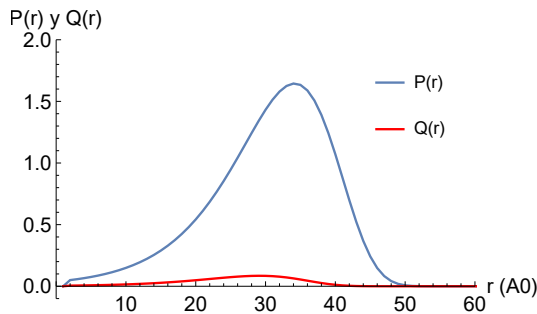


Figura 7.3.3: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor de la carga eléctrica  $\equiv z = -5$ .

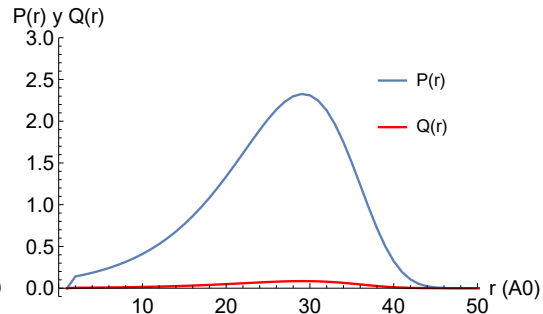


Figura 7.3.4: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor de la carga eléctrica  $\equiv z = -10$ .

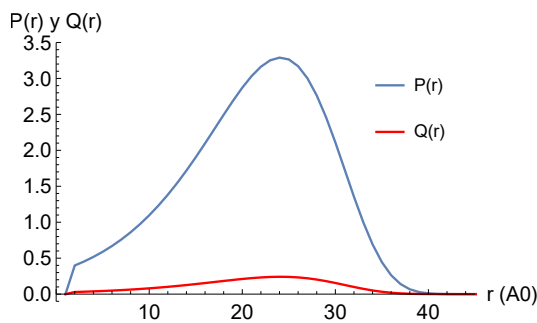


Figura 7.3.5: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor de la carga eléctrica  $\equiv z = -20$ .

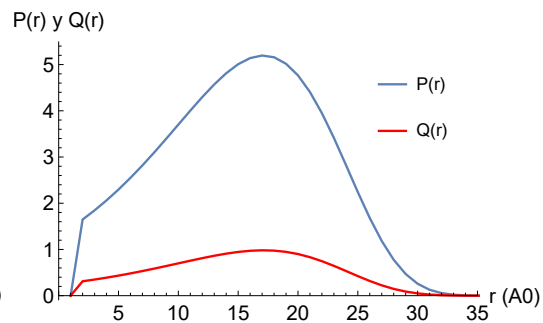


Figura 7.3.6: Representación de las funciones radiales,  $P(r)$  en azul y  $Q(r)$  en rojo, frente al índice del mallado para el radio. Para un valor de la carga eléctrica  $\equiv z = -50$ .

Podemos observar como a medida que aumenta en módulo la carga eléctrica  $z$ , las funciones radiales decaen más rápidamente (tienden a valor nulo más rápido) pero toman valores mayores en la zona cuyo valor es distinto de 0. Cabe destacar como la función radial  $Q(r)$  aumenta considerablemente su valor al aumentar  $z$ .

Este hecho es esperable, puesto que al ser mayor la carga eléctrica, la atracción electromagnética sufrida por la partícula también lo es, y en consecuencia la encontramos más cerca del núcleo.

La gráfica obtenida para los autovalores es:

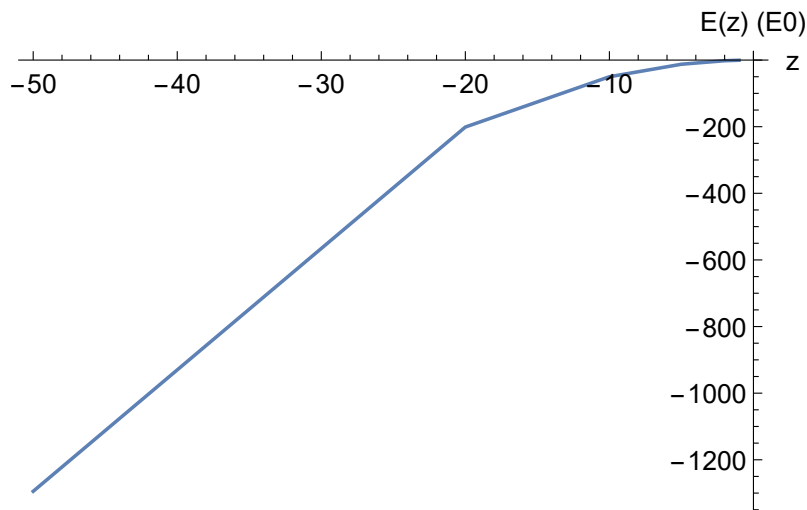


Figura 7.3.7: Representación de los autovalores de la energía,  $E(z)$ , frente a la carga eléctrica,  $z$ , en unidades de la carga del electrón, para valores del número cuántico principal  $n = 1$  y el número cuántico  $k = -1$

Se observa como la energía crece en valor absoluto cuando aumentamos  $z$  en módulo. Lo cual es lógico puesto que para átomos monoeléctricos la energía responde a la ecuación

$$E_n \approx -13,6 \cdot \frac{z^2}{n^2} \quad (eV). \quad (7.3)$$

## 7.4. Variación de los autovalores con $k$ para distintos valores de $z$

Veamos si al modificar el valor de la carga eléctrica  $z$ , los autovalores se vuelven independientes de  $k$  o no. Buscamos ver si como en el caso del potencial de Coulomb ( $z=-1$ ) la energía de ligadura se mantiene constante al variar en número cuántico  $k$  o si esto no ocurre.

Para  $z = -1, -2, -5, -10, -20$  y  $-50$  las gráficas obtenidas han sido las siguientes:

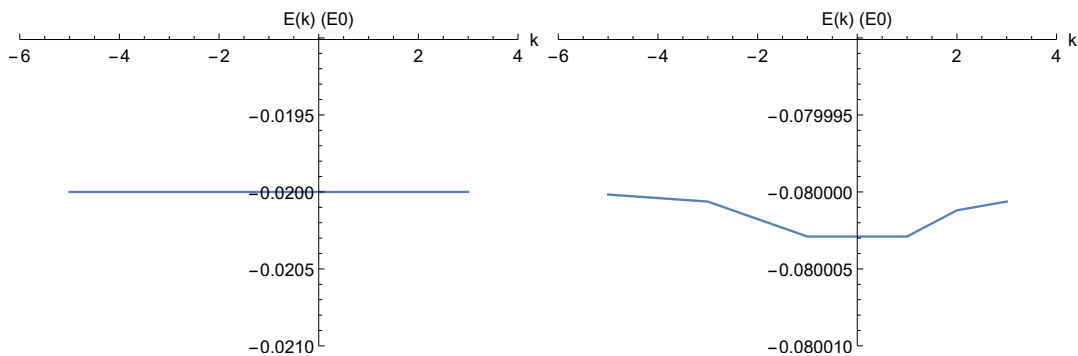


Figura 7.4.1: Representación de los autovalores de la energía,  $E(k)$ , frente al número cuántico  $k$ , para valores del número cuántico principal  $n = 5$  en el potencial de Coulomb  $r \cdot V(r) = -1$

Figura 7.4.2: Representación de los autovalores de la energía,  $E(k)$ , frente al número cuántico  $k$ , para valores del número cuántico principal  $n = 5$  en el potencial  $r \cdot V(r) = -2$

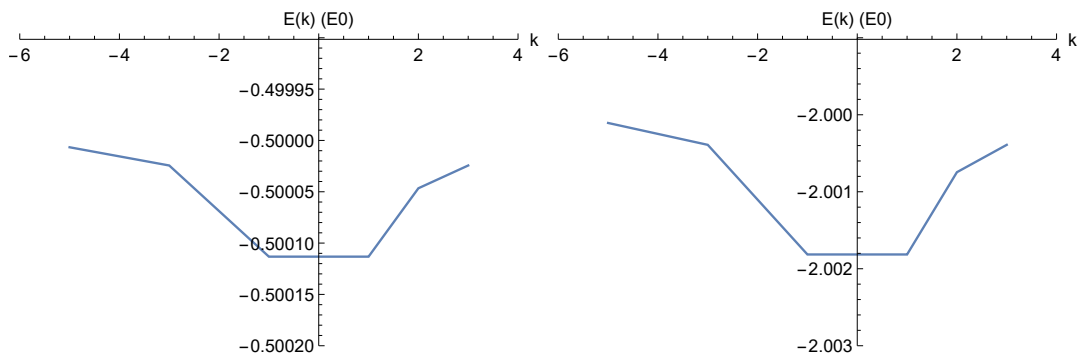


Figura 7.4.3: Representación de los autovalores de la energía,  $E(k)$ , frente al número cuántico  $k$ , para valores del número cuántico principal  $n = 5$  en el potencial  $r \cdot V(r) = -5$

Figura 7.4.4: Representación de los autovalores de la energía,  $E(k)$ , frente al número cuántico  $k$ , para valores del número cuántico principal  $n = 5$  en el potencial  $r \cdot V(r) = -10$

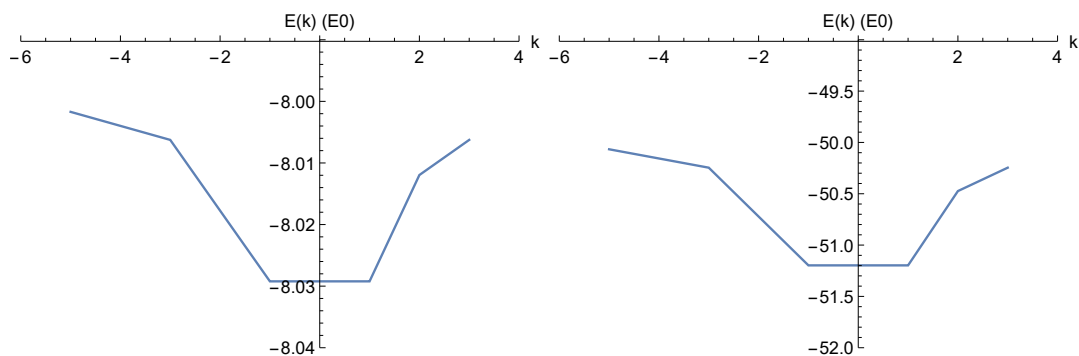


Figura 7.4.5: Representación de los autovalores de la energía,  $E(k)$ , frente al número cuántico  $k$ , para valores del número cuántico principal  $n = 5$  en el potencial  $r \cdot V(r) = -20$

Figura 7.4.6: Representación de los autovalores de la energía,  $E(k)$ , frente al número cuántico  $k$ , para valores del número cuántico principal  $n = 5$  en el potencial  $r \cdot V(r) = -50$

Observamos como a medida que aumenta la carga eléctrica  $z$ , la energía de ligadura  $E_k$  se vuelve cada vez más dependiente de  $k$ . Además, se observa como los autovalores toman cada vez valores menores cuanto menor es  $|k|$ . Cuando más nos alejamos de  $K = 0$ , la energía aumenta hacia ambos lados de forma simétrica (corresponde el mismo autovalor para  $k$  que para  $-k$ ).

## Capítulo 8

### Potencial polinómico:

$$r \cdot V(r) = -1 - \frac{1}{10} \cdot r$$

Nos centraremos en ver como se modifica el caso del potencial de Coulomb cuando añadimos un término polinómico adicional.

Para ello, estudiaremos como varían las funciones radiales y los autovalores cuando modificamos los diferentes números cuánticos y los términos del potencial  $r \cdot V(r) = -V_1 - V_2 \cdot r$ .

Mediante comparación obtendremos las diferencias existentes del caso polinómico con dos términos, respecto al potencial de Coulomb.

#### 8.1. Variación del potencial polinómico con el número cuántico principal $n$

Las gráficas obtenidas para los distintos valores del número cuántico principal  $n$  donde el número cuántico  $k=-1$ , y los parámetros del potencial  $V_1=-1$  y  $V_2=-\frac{1}{10}$  permanecían constantes han sido las siguientes:

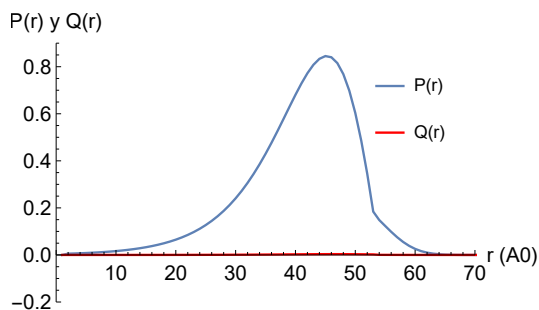


Figura 8.1.1: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n = 1$  en el potencial:  $r \cdot V(r) = -1 - \frac{1}{10} \cdot r$

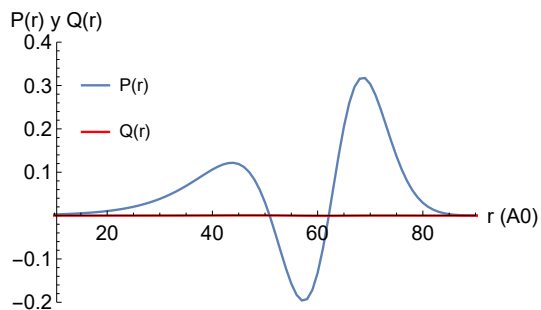


Figura 8.1.2: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n = 3$  en el potencial:  $r \cdot V(r) = -1 - \frac{1}{10} \cdot r$

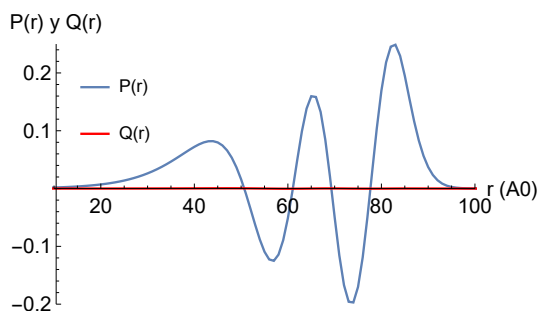


Figura 8.1.3: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n = 5$  en el potencial:  $r \cdot V(r) = -1 - \frac{1}{10} \cdot r$

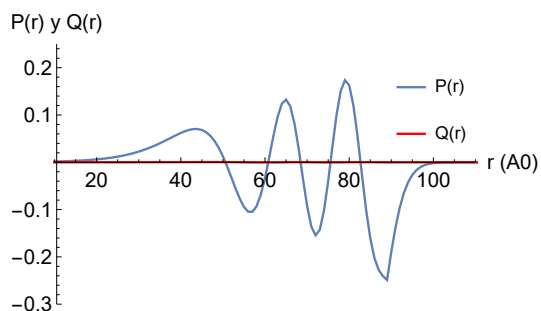


Figura 8.1.4: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n = 6$  en el potencial:  $r \cdot V(r) = -1 - \frac{1}{10} \cdot r$

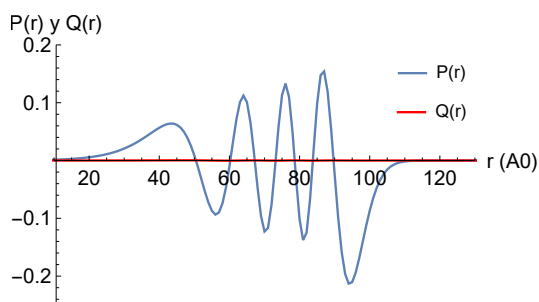


Figura 8.1.5: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n = 8$  en el potencial:  $r \cdot V(r) = -1 - \frac{1}{10} \cdot r$

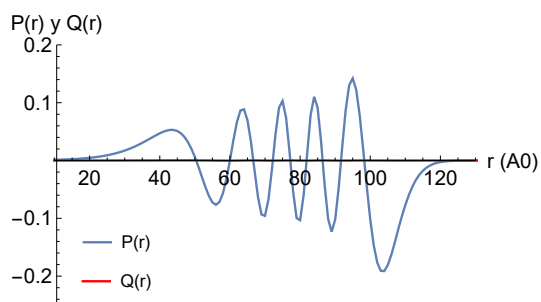


Figura 8.1.6: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n = 10$  en el potencial:  $r \cdot V(r) = -1 - \frac{1}{10} \cdot r$

## 8.2. VARIACIÓN DEL POTENCIAL POLINÓMICO CON EL NÚMERO CUÁNTICO $k=3$

Se observa como al igual que en el caso del potencial de Coulomb, la función radial  $P(r)$  corta al eje  $n - 1$  veces. Además, a medida que  $n$  aumenta, las funciones radiales toman valores máximos cada vez más bajos, aunque tardan más en decaer.

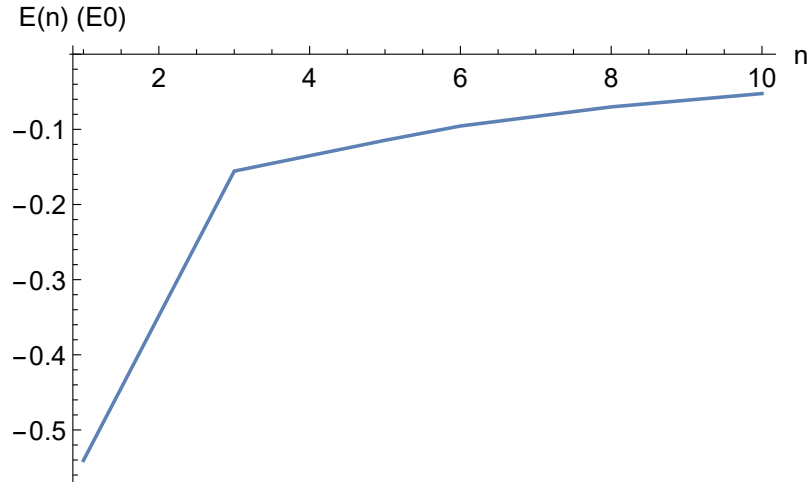


Figura 8.1.7: Representación de los autovalores de la energía,  $E(n)$ , frente al número cuántico principal,  $n$ , para un valor del número cuántico  $\equiv k = -1$  y para el potencial  $r \cdot V(r) = -1 - \frac{1}{10} \cdot r$

Vemos como a medida que aumenta el número cuántico principal  $n$ , la energía de ligadura aumenta en valor absoluto, eso sí, lo hace más lentamente que en caso del potencial de Coulomb.

## 8.2. Variación del potencial polinómico con el número cuántico $k$

Las gráficas obtenidas para los distintos valores del número cuántico  $k$  donde el número cuántico principal  $n=3$ , y los parámetros del potencial  $V_1=-1$  y  $V_2=-\frac{1}{10}$  permanecían constantes han sido las siguientes:



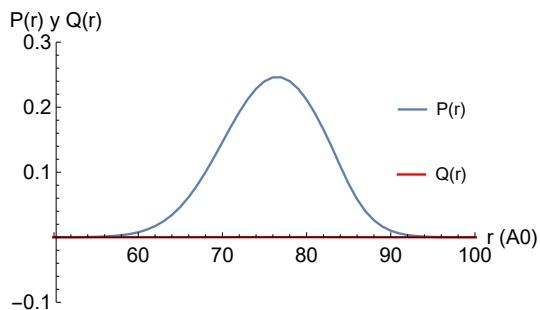


Figura 8.2.1: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico  $k=-5$  en el potencial:  $r \cdot V(r) = -1 - \frac{1}{10} \cdot r$

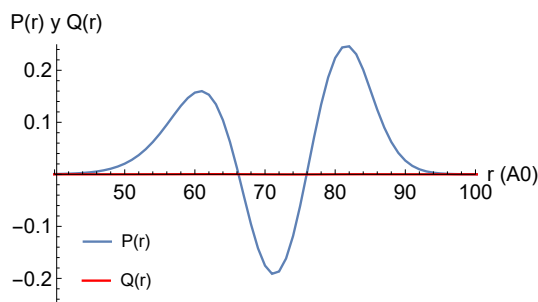


Figura 8.2.2: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico  $k=-3$  en el potencial:  $r \cdot V(r) = -1 - \frac{1}{10} \cdot r$

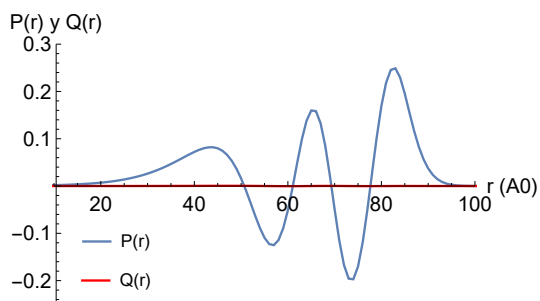


Figura 8.2.3: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico  $k=-1$  en el potencial:  $r \cdot V(r) = -1 - \frac{1}{10} \cdot r$

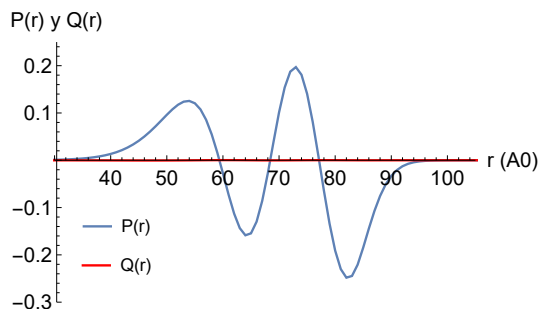


Figura 8.2.4: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico  $k=1$  en el potencial:  $r \cdot V(r) = -1 - \frac{1}{10} \cdot r$

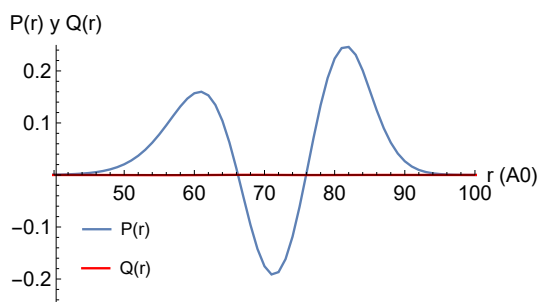


Figura 8.2.5: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico  $k=2$  en el potencial:  $r \cdot V(r) = -1 - \frac{1}{10} \cdot r$

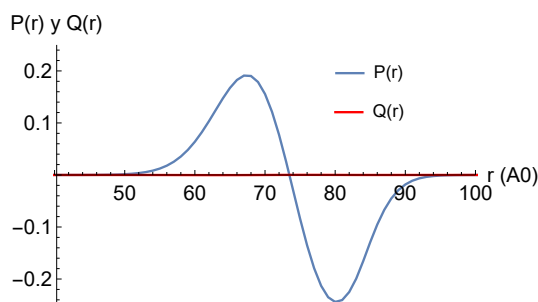


Figura 8.2.6: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico  $k=3$  en el potencial:  $r \cdot V(r) = -1 - \frac{1}{10} \cdot r$

### 8.3. VARIACIÓN DEL POTENCIAL POLINÓMICO CON EL PARÁMETRO $V_1$ DEL POTENCIAL 45

Se observa como para valores del número cuántico positivos,  $k > 0$ , la función de onda radial  $P(r)$  corta al eje  $n - k - 1$  veces, en cambio para valores del número cuántico negativos,  $k < 0$ ,  $P(r)$  corta al eje  $n + k$  veces, del mismo modo que en el caso del potencial de Coulomb.

Aparte vemos como las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  toman valores del mismo orden de magnitud, aunque varíe el número cuántico  $k$ .

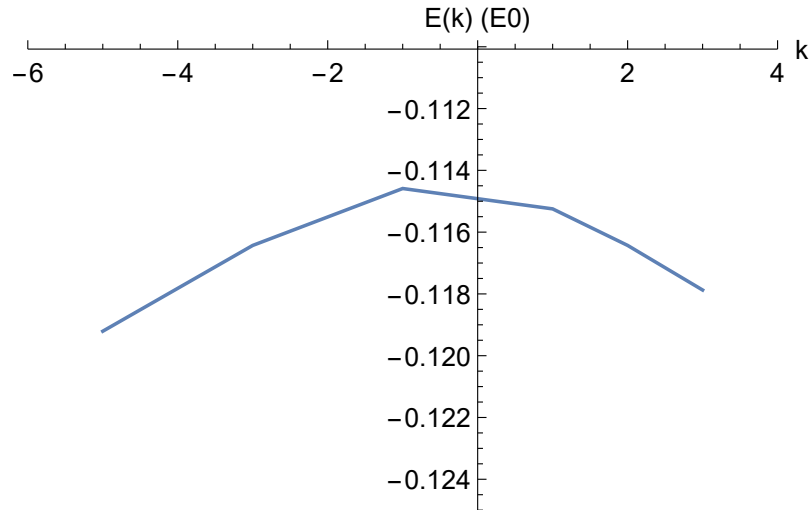


Figura 8.2.7: Representación de los autovalores de la energía,  $E(k)$ , frente al número cuántico,  $k$ , para un valor del número cuántico principal  $\equiv n = 5$  y para el potencial  $r \cdot V(r) = -1 - \frac{1}{10} \cdot r$

Respecto a la energía de ligadura vemos como varía con  $k$  (en aproximadamente una centésima parte), lo cual, contrasta con el caso del potencial de Coulomb donde esta permanecía constante frente a  $k$ . Además, resalta como la energía de ligadura toma valores mayores cuando  $|k|$  es pequeño y disminuye al aumentar  $|k|$ .

### 8.3. Variación del potencial polinómico con el parámetro $V_1$ del potencial

Veamos como varían las funciones de onda y los autovalores cuando modificamos el término  $V_1$  del potencial, equivalente a la carga eléctrica.

Para el número cuántico principal  $n=3$ , el número cuántico  $k=-1$  y el parámetro del potencial  $V_2=-\frac{1}{10}$  las gráficas obtenidas son las siguientes:

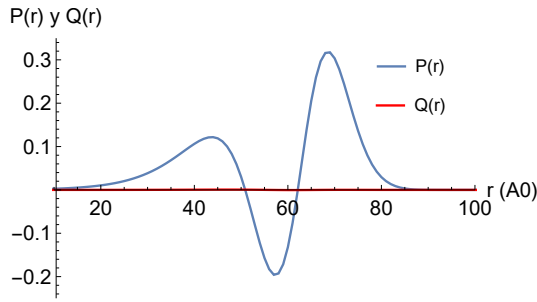


Figura 8.3.1: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del parámetro  $V_1 = -1$  en el potencial:  $r \cdot V(r) = -1 - \frac{1}{10} \cdot r$

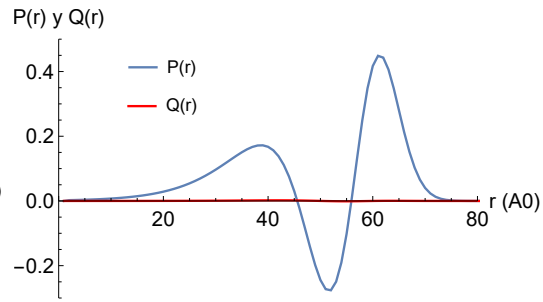


Figura 8.3.2: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del parámetro  $V_1 = -2$  en el potencial:  $r \cdot V(r) = -2 - \frac{1}{10} \cdot r$

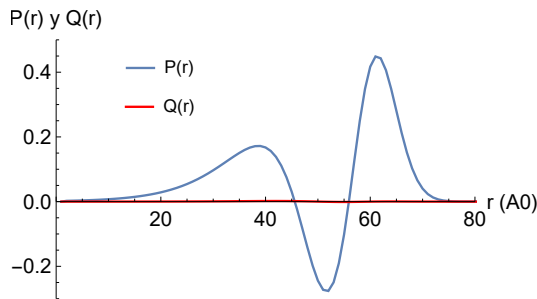


Figura 8.3.3: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del parámetro  $V_1 = -4$  en el potencial:  $r \cdot V(r) = -4 - \frac{1}{10} \cdot r$

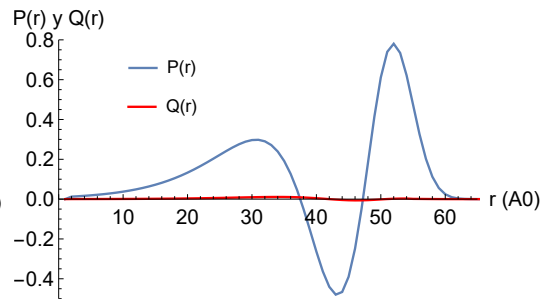


Figura 8.3.4: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del parámetro  $V_1 = -6$  en el potencial:  $r \cdot V(r) = -6 - \frac{1}{10} \cdot r$

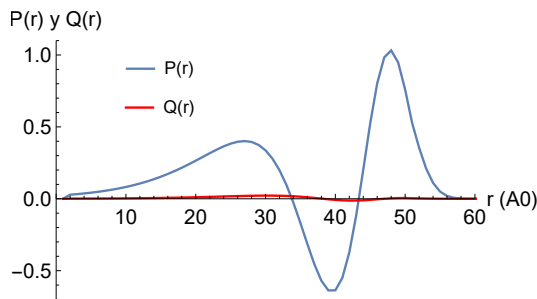


Figura 8.3.5: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del parámetro  $V_1 = -10$  en el potencial:  $r \cdot V(r) = -10 - \frac{1}{10} \cdot r$

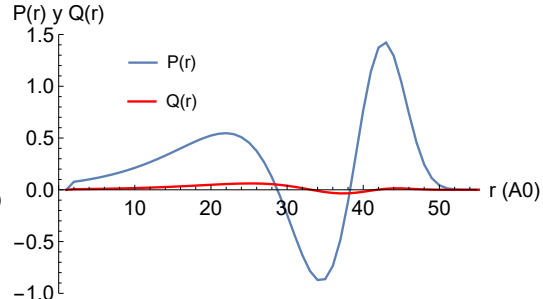


Figura 8.3.6: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del parámetro  $V_1 = -20$  en el potencial:  $r \cdot V(r) = -20 - \frac{1}{10} \cdot r$

#### 8.4. VARIACIÓN DEL POTENCIAL POLINÓMICO CON EL PARÁMETRO $V_2$ DEL POTENCIAL 47

Se observa como a medida que  $V_1$  aumenta, las funciones radiales toman valores máximos mayores a la vez que disminuye la distancia a la que decaen, como es esperable pues  $V_1$  representa la carga eléctrica, siendo la atracción cada vez mayor. El resultado obtenido es muy similar al caso del potencial de Coulomb.

Respecto a los autovalores:

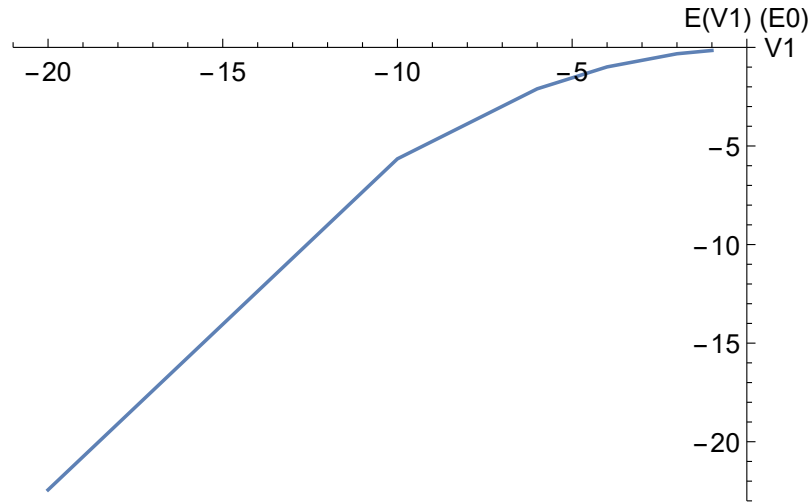


Figura 8.3.7: Representación de los autovalores de la energía,  $E(V_1)$ , frente al parámetro del potencial  $V_1$ , para un valor del número cuántico principal  $\equiv n = 3$ , del número cuántico  $k=-1$  y para el potencial  $r \cdot V(r) = -V_1 - \frac{1}{10} \cdot r$

A medida que aumenta  $V_1$  en valor absoluto vemos como la energía de ligadura decrece cada vez más rápidamente.

#### 8.4. Variación del potencial polinómico con el parámetro $V_2$ del potencial

Veamos por último como varían las funciones de onda y los autovalores cuando modificamos el término  $V_2$  del potencial.

Para el número cuántico principal  $n=3$ , el número cuántico  $k=-1$  y el parámetro del potencial  $V_1=-1$  las gráficas obtenidas han sido las siguientes:

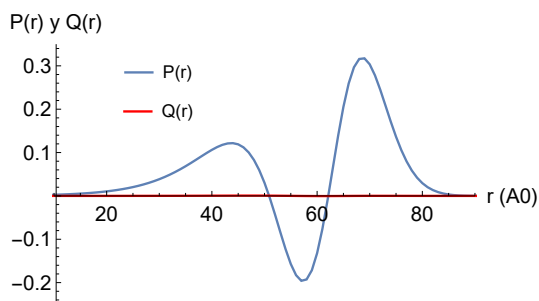


Figura 8.4.1: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del parámetro  $V_2 = -\frac{1}{10}$  en el potencial:  $r \cdot V(r) = -1 - \frac{1}{10} \cdot r$

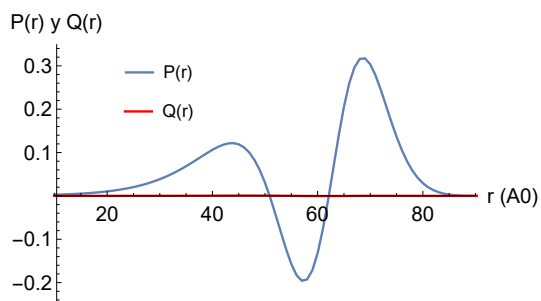


Figura 8.4.2: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del parámetro  $V_2 = -\frac{1}{5}$  en el potencial:  $r \cdot V(r) = -1 - \frac{1}{5} \cdot r$

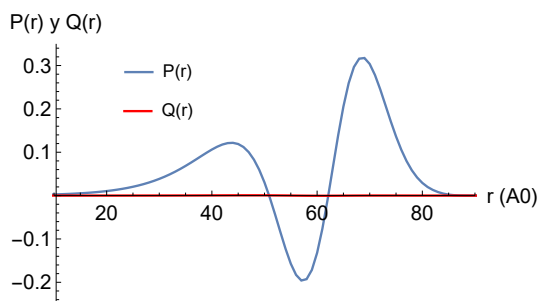


Figura 8.4.3: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del parámetro  $V_2 = -\frac{1}{2}$  en el potencial:  $r \cdot V(r) = -1 - \frac{1}{2} \cdot r$

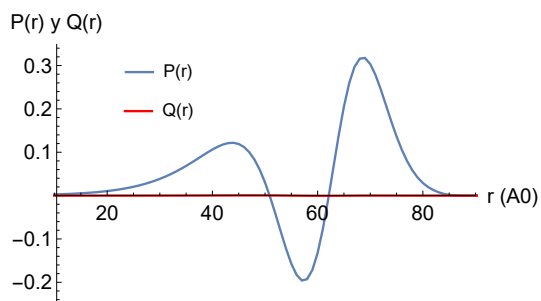


Figura 8.4.4: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del parámetro  $V_2 = -1$  en el potencial:  $r \cdot V(r) = -1 - 1 \cdot r$

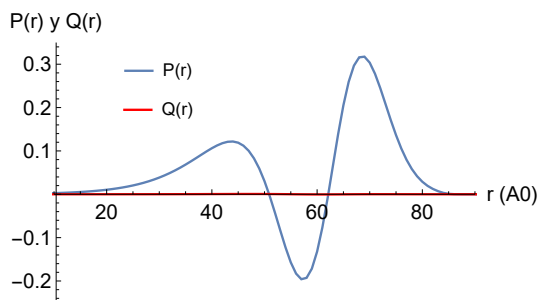


Figura 8.4.5: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del parámetro  $V_2 = -2$  en el potencial:  $r \cdot V(r) = -1 - 2 \cdot r$

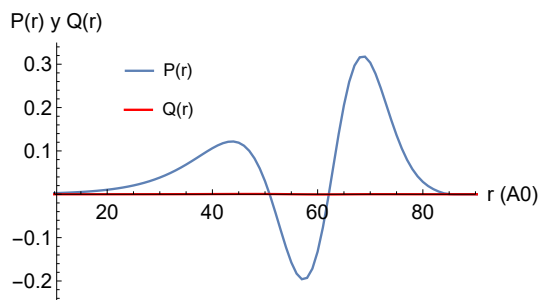


Figura 8.4.6: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del parámetro  $V_2 = -5$  en el potencial:  $r \cdot V(r) = -1 - 5 \cdot r$

#### 8.4. VARIACIÓN DEL POTENCIAL POLINÓMICO CON EL PARÁMETRO $V_2$ DEL POTENCIAL 49

En este caso vemos como las funciones radiales coinciden exactamente, esto se debe a que en el potencial  $r \cdot V(r) = -V_1 - V_2 \cdot r$ , despejando el potencial  $V(r)$  obtenemos  $V(r) = -\frac{V_1}{r} - V_2$ . Se puede ver como el término  $V_2$  es únicamente una constante del potencial y por lo tanto las funciones radiales son independientes del mismo.

Para los autovalores:

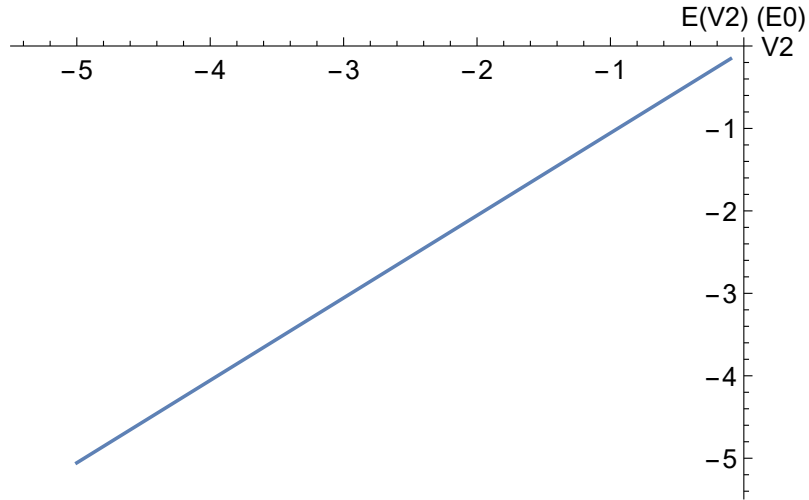


Figura 8.4.7: Representación de los autovalores de la energía,  $E(V_2)$ , frente al parámetro del potencial  $V_2$ , para un valor del número cuántico principal  $\equiv n = 3$ , del número cuántico  $k=-1$  y para el potencial  $r \cdot V(r) = -1 - V_2 \cdot r$

Se observa como la energía de ligadura decrece linealmente con el parámetro  $V_2$ . Este hecho tiene sentido pues  $V_2$  es una constante del potencial.

## Capítulo 9

### Potencial polinómico:

$$r \cdot V(r) = V_1 + V_2 \cdot r + V_3 \cdot r^2 + V_4 \cdot r^4$$

Veamos ahora el caso más general, un potencial polinómico con cuatro términos. Con ello veremos qué términos predominan en el potencial y nos servirá para obtener conclusiones del potencial polinómico.

Estudiaremos como varían las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  y los autovalores cuando modificamos los parámetros del potencial  $V_1, V_2, V_3, V_4$  y los números cuánticos  $n$  y  $k$ .

#### 9.1. Variación del potencial polinómico con el número cuántico principal $n$

Mantenemos constantes los parámetros del potencial  $V_1=V_2=V_3=-1, V_4= \frac{1}{10}$  y el valor del número cuántico  $k=-1$ .

Con ello, hemos obtenido las siguientes gráficas para las funciones de onda radiales:

9.1. VARIACIÓN DEL POTENCIAL POLINÓMICO CON EL NÚMERO CUÁNTICO PRINCIPAL N51

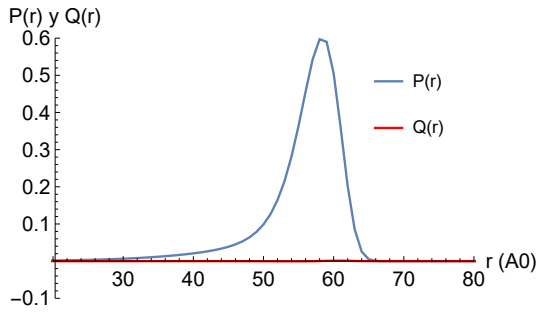


Figura 9.1.1: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=1$  y de los parámetros  $V_1=V_2=V_3=-1$  y  $V_4=0.1$

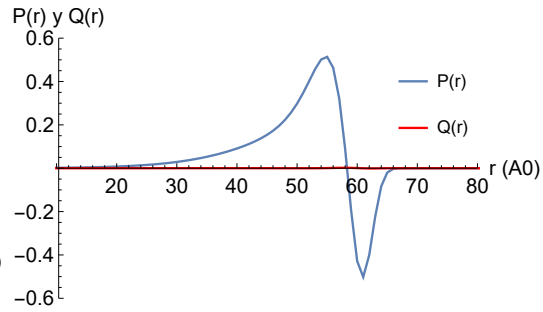


Figura 9.1.2: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=2$  y de los parámetros  $V_1=V_2=V_3=-1$  y  $V_4=0.1$

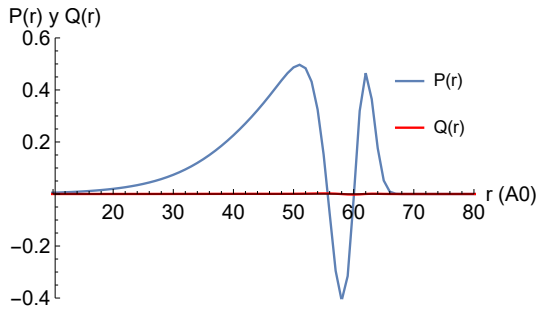


Figura 9.1.3: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=3$  y de los parámetros  $V_1=V_2=V_3=-1$  y  $V_4=0.1$

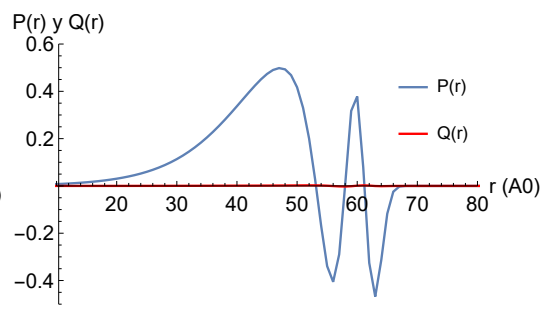


Figura 9.1.4: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=4$  y de los parámetros  $V_1=V_2=V_3=-1$  y  $V_4=0.1$

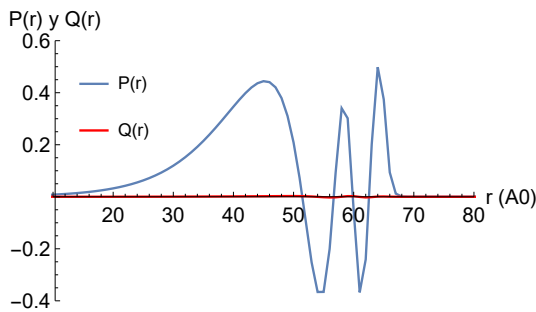


Figura 9.1.5: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=5$  y de los parámetros  $V_1=V_2=V_3=-1$  y  $V_4=0.1$

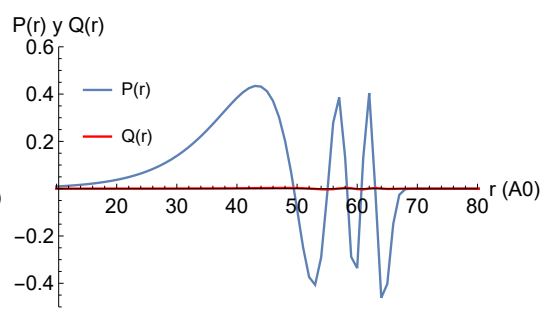


Figura 9.1.6: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=6$  y de los parámetros  $V_1=V_2=V_3=-1$  y  $V_4=0.1$



52 *CAPÍTULO 9. POTENCIAL POLINÓMICO:  $R \cdot V(R) = V_1 + V_2 \cdot R + V_3 \cdot R^2 + V_4 \cdot R^4$*

Se observa como de nuevo el número cuántico principal  $n$  está fuertemente relacionado con el número de cortes al eje.

Respecto a los autovalores hemos obtenido:

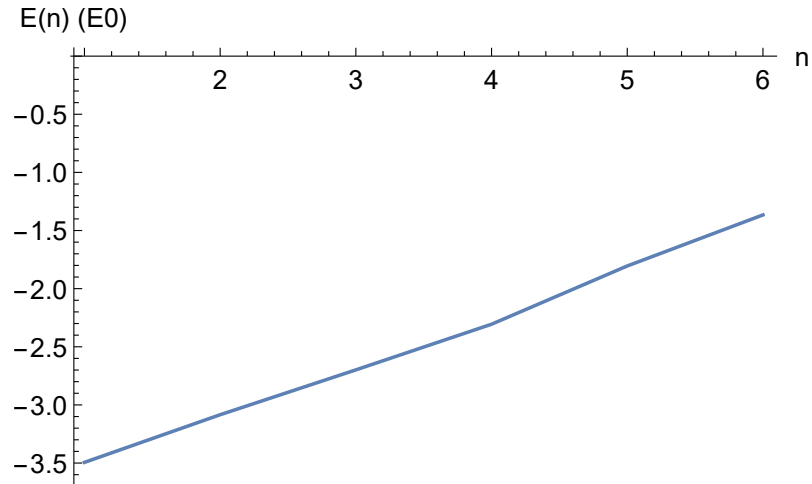


Figura 9.1.7: Representación de los autovalores de la energía,  $E(n)$ , frente al número cuántico principal  $n$ , para unos valores de los parámetros del potencial  $V_1=V_2=V_3=-1$  y  $V_4=0.1$

A medida que el número cuántico principal  $n$  disminuye, la energía de ligadura toma cada vez valores más pequeños, de una forma casi lineal.

## 9.2. Variación del potencial polinómico con el número cuántico $k$

Mantenemos constantes los parámetros del potencial  $V_1=V_2=V_3=-1$ ,  $V_4=\frac{1}{10}$  y el valor del número cuántico principal  $n=1$

En este caso, para las funciones de onda radiales hemos obtenido:

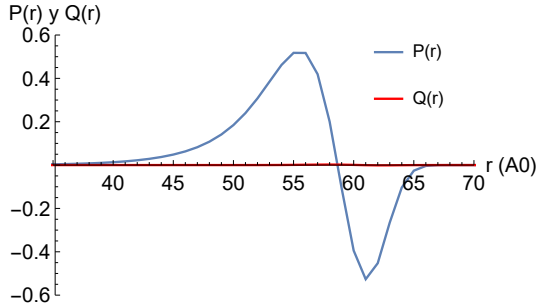


Figura 9.2.1: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=1$ , del número cuántico  $k=-2$  y de los parámetros  $V_1=V_2=V_3=-1$  y  $V_4=0.1$

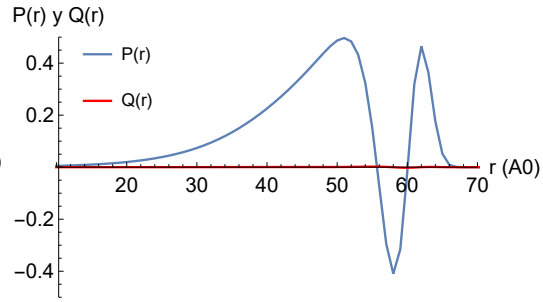


Figura 9.2.2: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=1$ , del número cuántico  $k=-1$  y de los parámetros  $V_1=V_2=V_3=-1$  y  $V_4=0.1$

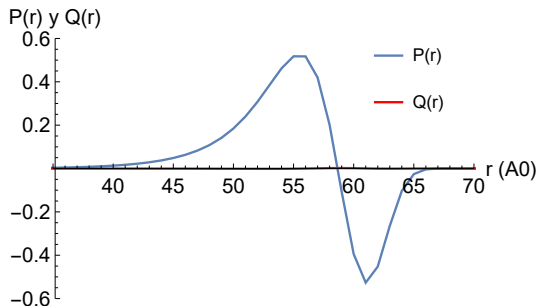


Figura 9.2.3: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=1$ , del número cuántico  $k=1$  y de los parámetros  $V_1=V_2=V_3=-1$  y  $V_4=0.1$

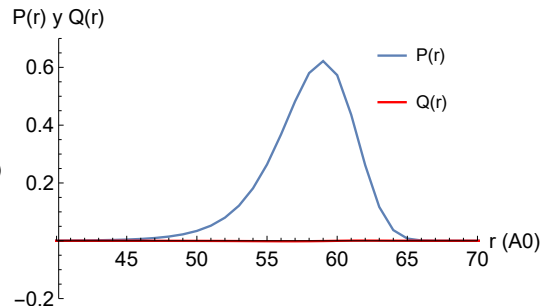


Figura 9.2.4: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=1$ , del número cuántico  $k=2$  y de los parámetros  $V_1=V_2=V_3=-1$  y  $V_4=0.1$

Vemos cómo afecta la variación del número cuántico  $k$  al corte con el eje, mediante la ecuación  $n_r = n - (l + 1)$ .

Para las energías de ligadura:

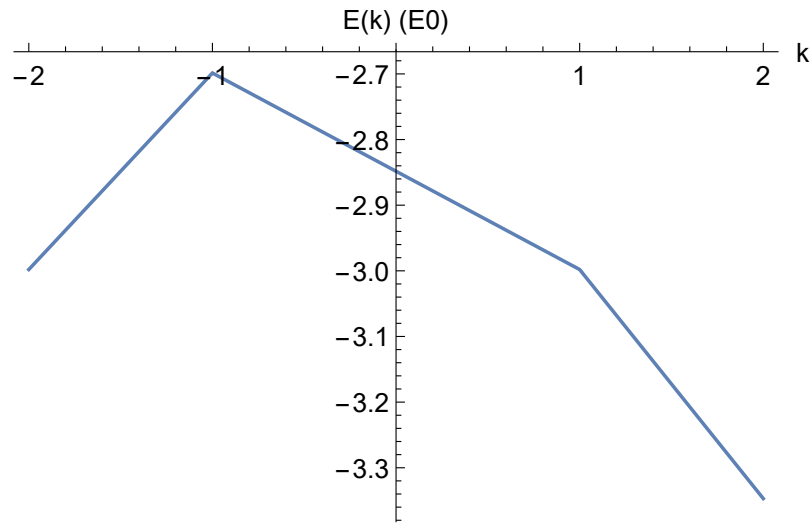


Figura 9.2.5: Representación de los autovalores de la energía,  $E(k)$ , frente al número cuántico  $k$ , para unos valores de los parámetros del potencial  $V_1=V_2=V_3=-1$  y  $V_4=0.1$  y del número cuántico principal  $n=3$ .

Podemos observar un máximo de energía para  $k=-1$ , el cual coincide con el caso en el que veces corta el eje.

### 9.3. Variación del potencial polinómico con el parámetro del potencial $V_1$

Mantenemos constantes los parámetros del potencial  $V_2=V_3=-1$ ,  $V_4 = \frac{1}{10}$  y tomamos un valor del número cuántico principal  $n=3$  y del número cuántico  $k=-1$ .

9.3. VARIACIÓN DEL POTENCIAL POLINÓMICO CON EL PARÁMETRO DEL POTENCIAL  $V_1$  55

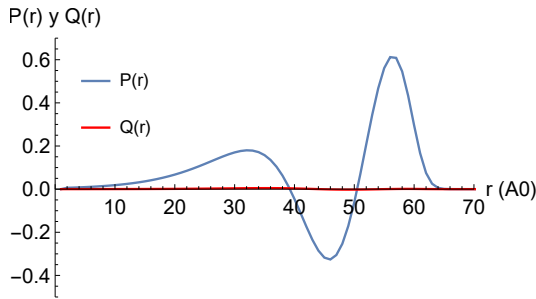


Figura 9.3.1: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=3$  y de los parámetros  $V_1=-5$ ,  $V_2=V_3=-1$  y  $V_4=0.1$

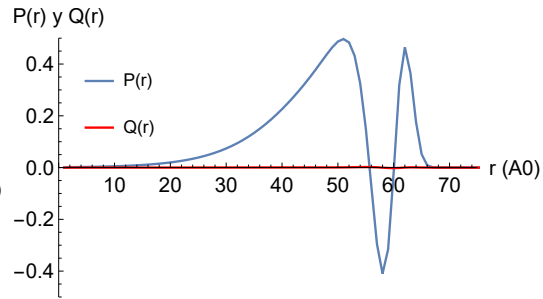


Figura 9.3.2: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=3$  y de los parámetros  $V_1=-1$ ,  $V_2=V_3=-1$  y  $V_4=0.1$

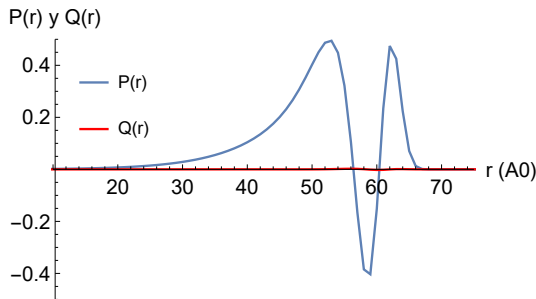


Figura 9.3.3: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=3$  y de los parámetros  $V_1=-\frac{1}{2}$ ,  $V_2=V_3=-1$  y  $V_4=0.1$

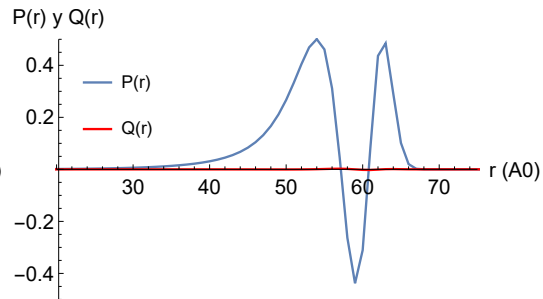


Figura 9.3.4: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=3$  y de los parámetros  $V_1=\frac{1}{2}$ ,  $V_2=V_3=-1$  y  $V_4=0.1$

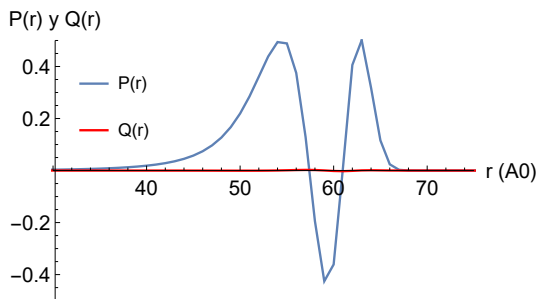


Figura 9.3.5: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=3$  y de los parámetros  $V_1=1$ ,  $V_2=V_3=-1$  y  $V_4=0.1$

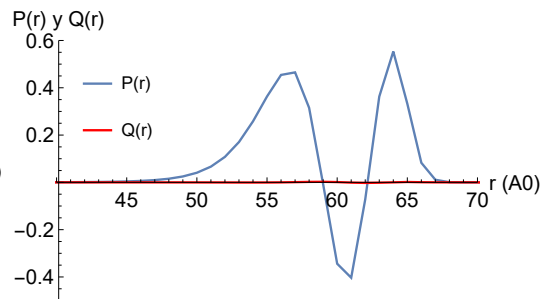


Figura 9.3.6: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=3$  y de los parámetros  $V_1=5$ ,  $V_2=V_3=-1$  y  $V_4=0.1$

Los autovalores obtenidos han sido las siguientes:

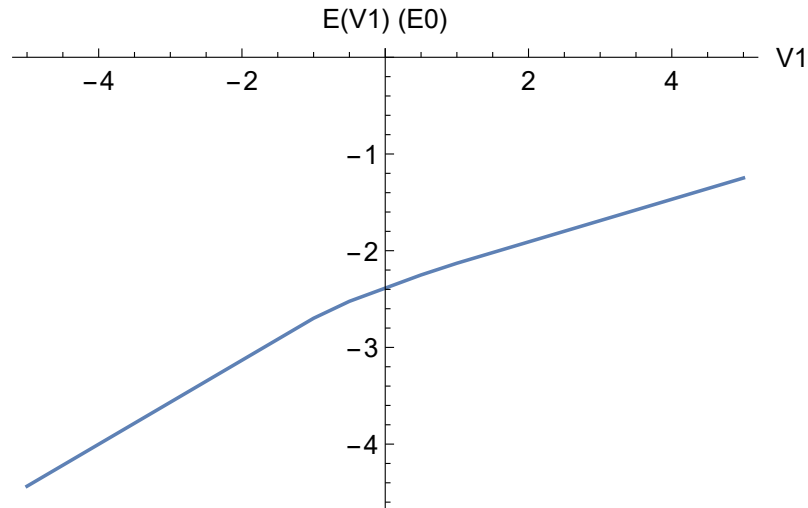


Figura 9.3.7: Representación de los autovalores de la energía,  $E(V_1)$ , frente al parámetro del potencial  $V_1$ , para unos valores de los parámetros del potencial  $V_2=V_3=-1$ ,  $V_4=0.1$  y del número cuántico principal  $n=3$

Se observa como a medida que el parámetro del potencial  $V_1$  disminuye, la energía aumenta en módulo.

### 9.4. Variación del potencial polinómico con el parámetro del potencial $V_2$

Estudiaremos ahora como se comporta el potencial polinómico al mantener constantes los parámetros del potencial  $V_1=V_3=-1$ ,  $V_4=\frac{1}{10}$  y tomando un valor del número cuántico principal  $n=3$  y del número cuántico  $k=-1$ .

En esto caso las funciones radiales toman la forma:

9.4. VARIACIÓN DEL POTENCIAL POLINÓMICO CON EL PARÁMETRO DEL POTENCIAL  $V_2$  57

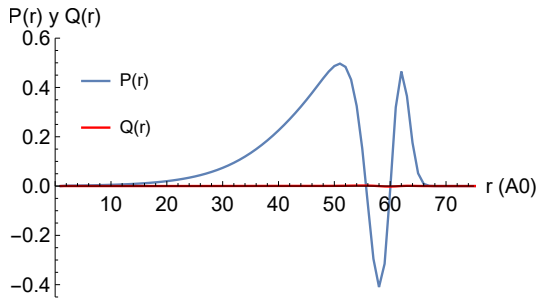


Figura 9.4.1: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=3$  y de los parámetros  $V_2=-5$ ,  $V_1=V_3=-1$  y  $V_4=0.1$

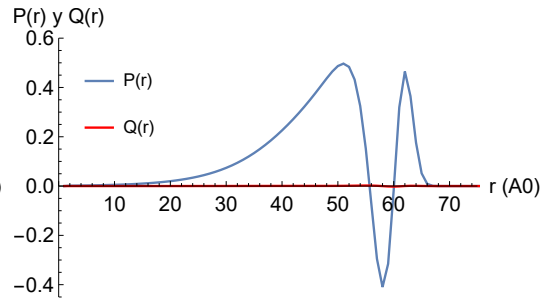


Figura 9.4.2: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=3$  y de los parámetros  $V_2=-1$ ,  $V_1=V_3=-1$  y  $V_4=0.1$

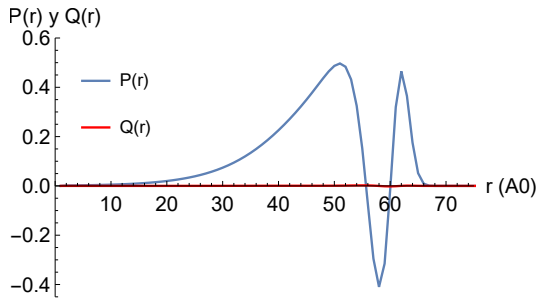


Figura 9.4.3: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=3$  y de los parámetros  $V_2=-\frac{1}{2}$ ,  $V_1=V_3=-1$  y  $V_4=0.1$

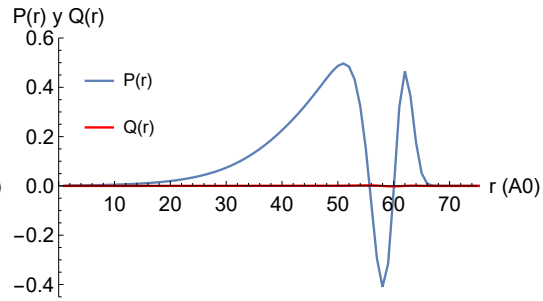


Figura 9.4.4: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=3$  y de los parámetros  $V_2=0$ ,  $V_1=V_3=-1$  y  $V_4=0.1$

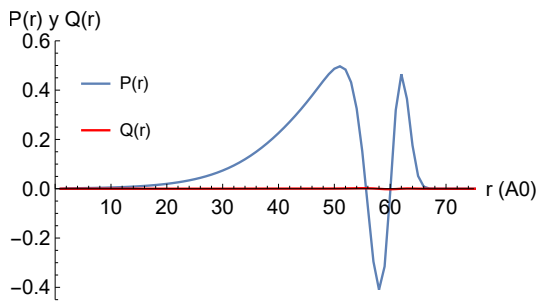


Figura 9.4.5: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=3$  y de los parámetros  $V_2=\frac{1}{2}$ ,  $V_1=V_3=-1$  y  $V_4=0.1$

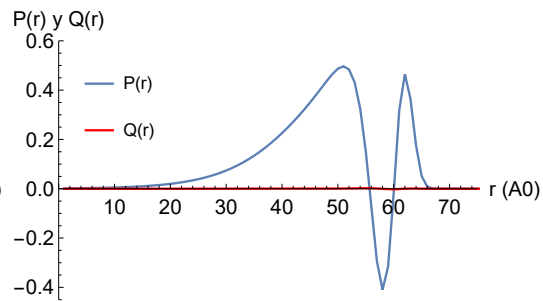


Figura 9.4.6: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=3$  y de los parámetros  $V_2=1$ ,  $V_1=V_3=-1$  y  $V_4=0.1$

Se observa como las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  permanecen invariantes frente a la variación de  $V_2$ , esto se debe a que  $V_2$  es una constante del potencial.

Respecto a los autovalores, la gráfica obtenida es la siguiente:

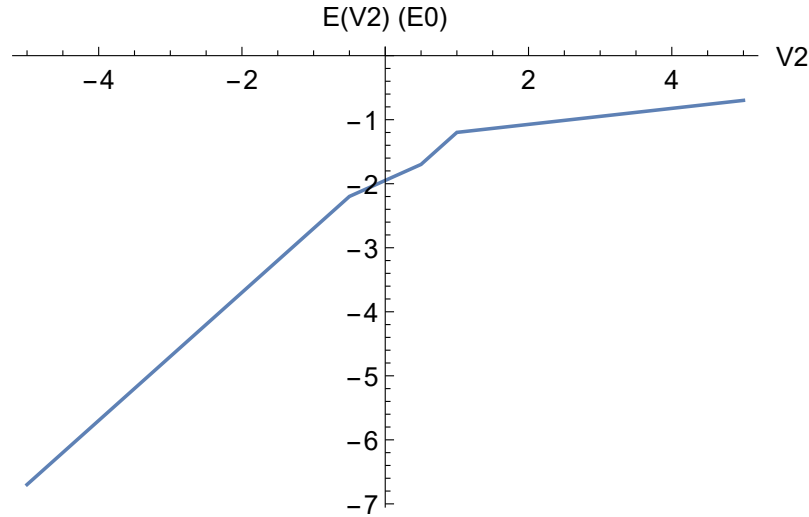


Figura 9.4.7: Representación de los autovalores de la energía,  $E(V_2)$ , frente al parámetro del potencial  $V_2$ , para unos valores de los parámetros del potencial  $V_1=V_3=-1$ ,  $V_4=0.1$  y del número cuántico principal  $n=3$

En ella, al igual que para  $V_1$ , vemos como al disminuir  $V_2$  la energía aumenta en módulo. En este caso, se observa como para valores negativos de  $V_2$  la energía disminuye más rápidamente que para los valores positivos.

### 9.5. Variación del potencial polinómico con el parámetro del potencial $V_3$

Veamos cómo se comporta el potencial polinómico al mantener constantes los parámetros del potencial  $V_1=V_2=-1$ ,  $V_4= \frac{1}{10}$  y tomando un valor del número cuántico principal  $n=3$  y del número cuántico  $k=-1$ .

Hemos obtenido las siguientes gráficas para las funciones de onda radiales para los diferentes valores del parámetro  $V_3$ :

9.5. VARIACIÓN DEL POTENCIAL POLINÓMICO CON EL PARÁMETRO DEL POTENCIAL  $V_3$  59

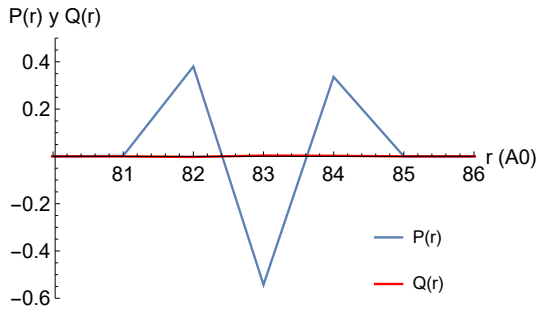


Figura 9.5.1: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=3$  y de los parámetros  $V_3=-10$ ,  $V_1=V_2=-1$  y  $V_4=0.1$

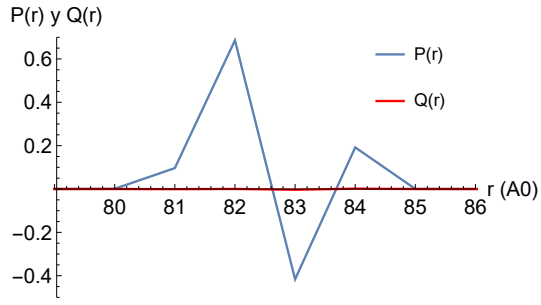


Figura 9.5.2: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=3$  y de los parámetros  $V_3=-8$ ,  $V_1=V_2=-1$  y  $V_4=0.1$

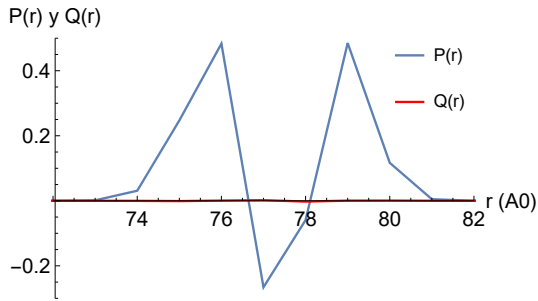


Figura 9.5.3: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=3$  y de los parámetros  $V_3=-5$ ,  $V_1=V_2=-1$  y  $V_4=0.1$

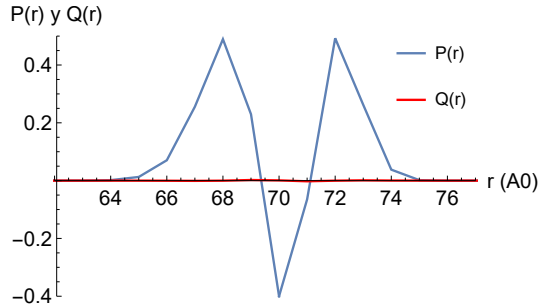


Figura 9.5.4: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=3$  y de los parámetros  $V_3=-3$ ,  $V_1=V_2=-1$  y  $V_4=0.1$

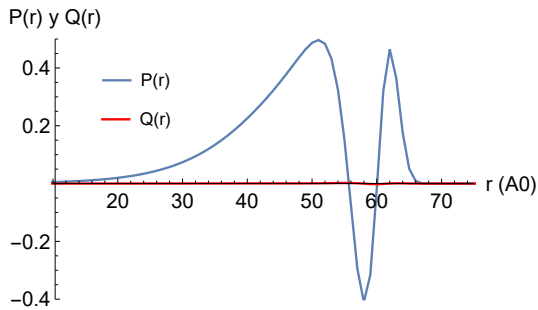


Figura 9.5.5: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=3$  y de los parámetros  $V_3=-1$ ,  $V_1=V_2=-1$  y  $V_4=0.1$

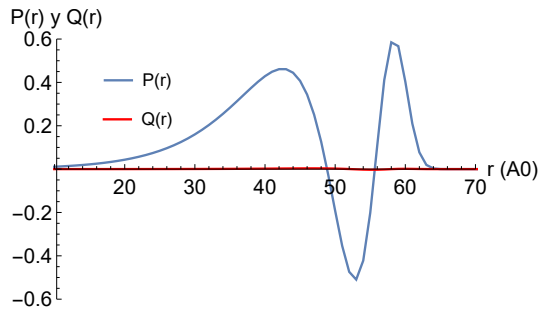


Figura 9.5.6: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=3$  y de los parámetros  $V_3=-\frac{1}{2}$ ,  $V_1=V_2=-1$  y  $V_4=0.1$



Se observa como para valores bajos de  $V_3$  (menores que  $V_3 < -3$ ) disminuye fuertemente el intervalo donde las funciones de onda radiales toman valores no nulos, lo cual nos produce una pérdida de definición en nuestra imagen haciéndose esta muy picuda.

Para los autovalores:

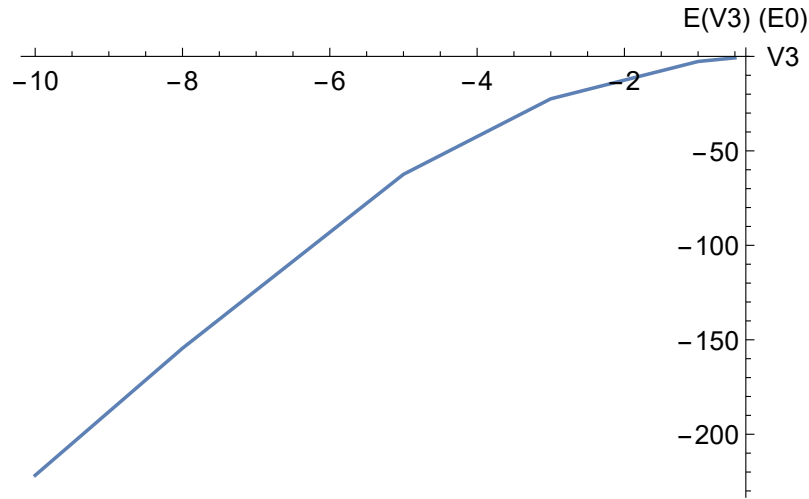


Figura 9.5.7: Representación de los autovalores de la energía,  $E(V_3)$ , frente al parámetro del potencial  $V_3$ , para unos valores de los parámetros del potencial  $V_1=V_2=-1$ ,  $V_4=0.1$  y del número cuántico principal  $n=3$

Vemos claramente como al disminuir el valor de  $V_3$  la energía aumenta rápidamente en módulo.

## 9.6. Variación del potencial polinómico con el parámetro del potencial $V_4$

Veamos cómo se comporta el potencial polinómico al mantener constantes los parámetros del potencial  $V_1=V_2=V_3=-1$  y tomando un valor del número cuántico principal  $n=3$  y del número cuántico  $k=-1$ .

Hemos obtenido las siguientes gráficas para las funciones de onda radiales para los diferentes valores del parámetro  $V_4$ :

9.6. VARIACIÓN DEL POTENCIAL POLINÓMICO CON EL PARÁMETRO DEL POTENCIAL  $V_4$  61

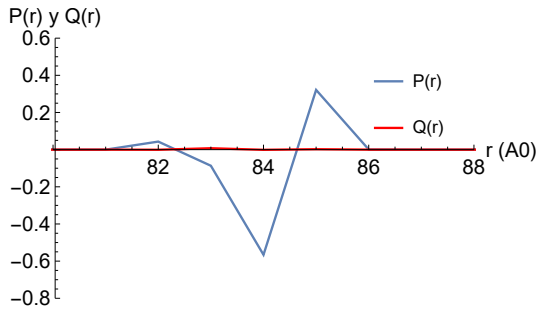


Figura 9.6.1: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=3$  y de los parámetros  $V_4=-0.1$  y  $V_1=V_2=V_3=-1$

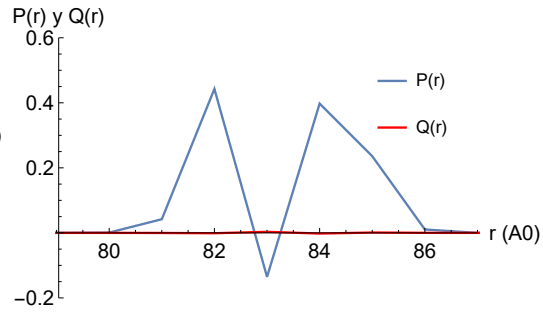


Figura 9.6.2: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=3$  y de los parámetros  $V_4=0$  y  $V_1=V_2=V_3=-1$

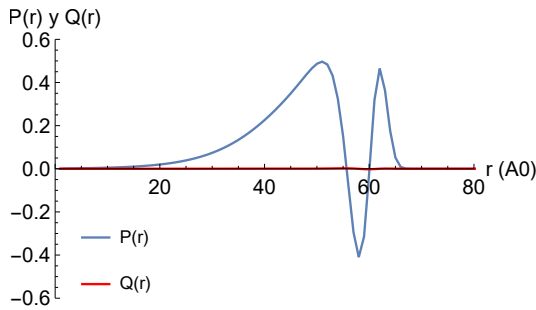


Figura 9.6.3: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=3$  y de los parámetros  $V_4=0.1$  y  $V_1=V_2=V_3=-1$

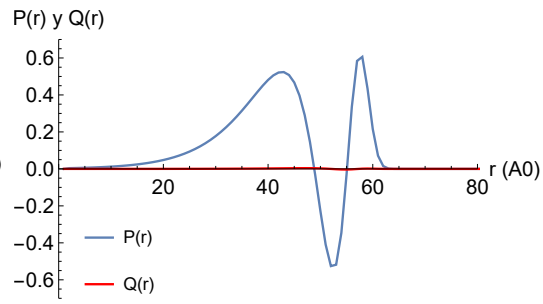


Figura 9.6.4: Representación de las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  frente al radio (en unidades de  $R_0$ ), para valores del número cuántico principal  $n=3$  y de los parámetros  $V_4=0.2$  y  $V_1=V_2=V_3=-1$

Al igual que para  $V_3$ , se observa como para valores bajos de  $V_4$  (menores que  $V_4 < \frac{1}{10}$ ) disminuye fuertemente el intervalo donde las funciones de onda radiales toman valores no nulos, lo cual nos produce una pérdida de definición en nuestra imagen haciéndose esta muy picuda.

Los autovalores en este caso son los siguientes:

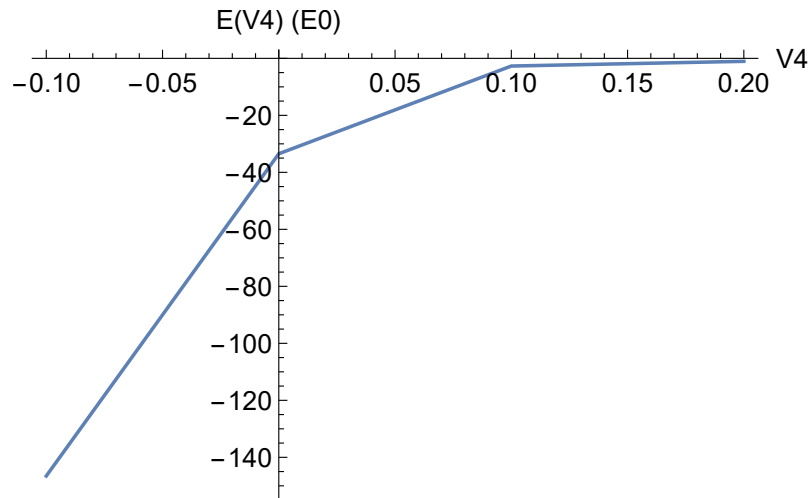


Figura 9.6.5: Representación de los autovalores de la energía,  $E(V_4)$ , frente al parámetro del potencial  $V_4$ , para unos valores de los parámetros del potencial  $V_1=V_2=V_3=-1$  y del número cuántico principal  $n=3$

De nuevo observamos como a medida que disminuye  $V_4$ , la energía aumenta en módulo, haciéndolo más rápidamente cuanto menos es el valor de  $V_4$  y sobre todo cuando este es negativo.

## Conclusiones:

En este artículo hemos abordado el problema de resolver numéricamente la ecuación de Dirac para potenciales confinantes a partir del código *RADIAL*.

Para ello hemos realizado un análisis teórico fundamentado mediante el cual calcular estas soluciones utilizando el método de series de potencias e interpolando mediante splines cúbicos.

Hemos obtenido las funciones de onda radiales de diversos potenciales confinantes así como sus autovalores correspondientes y los estados ligados, relacionándolos con casos bien conocidos como el potencial del átomo de hidrógeno o el potencial de Coulomb.

Así, hemos explicado potenciales de tipo exponencial ( $r \cdot V(r) = z + z_s \cdot e^{-Ar}$ ) y polinómico ( $r \cdot V(r) = V_1 + V_2 \cdot r + V_3 \cdot r^2 + V_4 \cdot r^4$ ).

## Summary:

In this article we have solved Dirac equation numerically for confining potentials using the code *RADIAL*.

In order to do so, we have done a theoretical analysis through which we were able to calculate these solutions using the power series method and interpolating using cubic splines.

We have found the radial wave solutions for divers confining potentials as well as their eigenvalues and bound states, relating them with well known cases such as the hydrogen atom and the Coulomb potential.

In this way, we have solved potentials like, exponential ( $r \cdot V(r) = z + z_s \cdot e^{-Ar}$ ) and polynomial ( $r \cdot V(r) = V_1 + V_2 \cdot r + V_3 \cdot r^2 + V_4 \cdot r^4$ ).

## Apéndice A

# Instalación y ejecución del código “RADIAL”:

Para la utilización del código únicamente necesitaremos tener instalado el programa Fortran en cualquiera de sus versiones a partir de Fortran 77. En primer lugar, copiamos el código del paquete Radial como se muestra en la imagen A.1 del enlace:

<http://users.df.uba.ar/dmitnik/estructura3/programas/salvat/salvat.for>

```

C
C
C *****
C ** DEMO FOR SUBROUTINE PACKAGE RADIAL **
C *****
C
C EXPONENTIALLY SCREENED COULOMB FIELDS.
C
C IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C PARAMETER (NDIM=800,NPPG=NDIM+1,NPTG=NDIM+NPPG)
C PARAMETER (SL=137.036D0,PI=3.1415926535897932D0)
C DIMENSION R0(NDIM),RV0(NDIM)
C ***** COULOMB WAVE FUNCTION PARAMETERS.
C COMMON/OCOUL/WAVNUM,ETA,DELTA
C ***** OUTPUT RADIAL FUNCTIONS.
C COMMON/RADWF/RAD(NDIM),P(NDIM),Q(NDIM),NGP,ILAST,IER
C
C ***** READ FIELD PARAMETERS.
C
C 10 CONTINUE
C WRITE(6,*) ' POTENTIAL FUNCTION: R*V(R)=Z+ZS*EXP(-A*R)'
C WRITE(6,*) ' ENTER Z, ZS AND A ...'
C READ(5,*) Z,ZS,ALPHA
C ALPHA=DABS(ALPHA)
C
C ***** POTENTIAL GRID.
C
C RATIO=1.15D0
C RNN=35.0D0/DMAX1(ALPHA,1.0D0)
C NV=600
C STEP=RNN/(NV-100.0D0)
C CALL GRID(R0,RATIO,STEP,RNN,NV)
C
C DO 20 I=1,NV
C RV0(I)=Z+ZS*DEXP(-ALPHA*R0(I))
C 20 CONTINUE
C
C ADBP0031
C ADBP0032
C ADBP0033
C ADBP0034
C ADBP0035
C ADBP0036
C ADBP0037
C ADBP0038
C ADBP0039
C ADBP0040
C ADBP0041
C ADBP0042
C ADBP0043
C ADBP0044
C ADBP0045
C ADBP0046
C ADBP0047
C ADBP0048
C ADBP0049
C ADBP0050
C ADBP0051
C ADBP0052
C ADBP0053
C ADBP0054
C ADBP0055
C ADBP0056
C ADBP0057
C ADBP0058
C ADBP0059
C ADBP0060
C ADBP0061
C ADBP0062
C ADBP0063
C ADBP0064
C ADBP0065
C ADBP0066

```

Figura A.1: Código Radial del enlace:  
<http://users.df.uba.ar/dmitnik/estructura3/programas/salvat/salvat.for>

Lo copiamos en un nuevo archivo de Fortran semejante a la imagen A.2 (Válido tanto para Windows como Linux o cualquier otro sistema operativo, ya que no es necesario tener instalado ningún paquete adicional).

```

1 C ADBP0031
2 C ADBP0032
3 C ***** ADBP0033
4 C ** DEMO FOR SUBROUTINE PACKAGE RADIAL ** ADBP0034
5 C ***** ADBP0035
6 C ADBP0036
7 C EXPONENTIALLY SCREENED COULOMB FIELDS. ADBP0037
8 C ADBP0038
9 ADBP0039
10 ADBP0040
11 ADBP0041
12 ADBP0042
13 C ***** COULOMB WAVE FUNCTION PARAMETERS. ADBP0043
14 COMMON/OCOUL/WAVNUM,ETA,DELTA ADBP0044
15 C ***** OUTPUT RADIAL FUNCTIONS. ADBP0045
16 COMMON/RADWF/RAD(NDIM),P(NDIM),Q(NDIM),NGP,ILAST,IER ADBP0046
17 C ADBP0047
18 C ***** READ FIELD PARAMETERS. ADBP0048
19 C ADBP0049
20 10 CONTINUE ADBP0050
21 WRITE(6,*) ' POTENTIAL FUNCTION: R*V(R)=Z+ZS*EXP(-A*R)' ADBP0051
22 WRITE(6,*) ' ENTER Z, ZS AND A ...' ADBP0052
23 READ(5,*) Z,ZS,ALPHA ADBP0053
24 ALPHA=DABS(ALPHA) ADBP0054
25 C ADBP0055
26 C ***** POTENTIAL GRID. ADBP0056
27 C ADBP0057
28 RATIO=1.1500 ADBP0058
29 RNN=35.000/DMAX1(ALPHA,1.000) ADBP0059
30 NV=600 ADBP0060
31 STEP=RNN/(NV-100.000) ADBP0061
32 CALL GRID(R0,RATIO,STEP,RNN,NV) ADBP0062
33 C ADBP0063
34 DO 20 I=1,NV ADBP0064
35 RV0(I)=Z+ZS*DEXP(-ALPHA*R0(I)) ADBP0065

```

Figura A.2: Código Radial en Fortran 95.

Guardamos el archivo y lo ejecutamos mediante un terminal. Utilizando Linux, más concretamente Ubuntu, buscamos la carpeta en la cual tenemos nuestro código guardado, utilizamos un compilador como puede ser gfortran y ejecutamos el archivo (usando el comando ./a.out). Si los pasos se han seguido correctamente el terminal nos devolverá lo mismo que la imagen A.3.

```

ubuntu@ubuntu-VirtualBox:~$ cd Descargas/
ubuntu@ubuntu-VirtualBox:~/Descargas$ gfortran tfg.f
ubuntu@ubuntu-VirtualBox:~/Descargas$ ./a.out
POTENTIAL FUNCTION: R*V(R)=Z+ZS*EXP(-A*R)
ENTER Z, ZS AND A ...

```

Figura A.3: Ejecución del código con compilador gfortran mediante una terminal.

Introducimos las constantes que se nos solicitan para el potencial ( $z$ ,  $zS$  y  $A$ ) y seleccionamos para nuestro caso el caso 3, (introduciendo 3 en el terminal) el relativo a el caso de la Ecuación de Dirac resuelta para un estado ligado (Se pueden elegir cualquier otro tipo pues también funciona correctamente). Introducimos los números cuánticos y la precisión deseada correspondientes en la terminal como se muestra en la imagen A.4.

```

ubuntu@ubuntu-VirtualBox:~$ cd Descargas/
ubuntu@ubuntu-VirtualBox:~/Descargas$ gfortran tfg.f
ubuntu@ubuntu-VirtualBox:~/Descargas$ ./a.out
POTENTIAL FUNCTION: R*V(R)=Z+ZS*EXP(-A*R)
ENTER Z, ZS AND A ...
-1
-50
5

SELECT ONE OPTION ...
  1: SCHRODINGER EQUATION. BOUND STATE.
  2: SCHRODINGER EQUATION. FREE STATE.
  3: DIRAC EQUATION. BOUND STATE.
  4: DIRAC EQUATION. FREE STATE.
3

ENTER N, K AND EPS ...
1
-1
1.0E-13

```

Figura A.4: Ejecución del código con compilador gfortran mediante una terminal introduciendo las constantes del potencial, números cuánticos y precisión deseados.

En este punto el programa se ejecutará para los datos introducidos y nos devolverá las diferentes iteraciones realizadas por la subrutina *DBOUND* hasta obtener la precisión deseada. Cuando esto suceda nos devolverá la energía de ligadura para el estado deseado (junto con todos los datos introducidos y el potencial resuelto para el mismo) y se nos creará un fichero *.dat* en la misma carpeta en la cual hemos guardado el código en el que tendremos las funciones radiales  $P(r)$  y  $Q(r)$  junto con  $r$  para poder ser trasladadas fácilmente a un programa de representación en el que poder visualizarlas. Obtendremos finalmente algo similar a la imagen A.5, en la que como podemos ver al final como el propio código nos invita a volver a elegir uno de los 4 casos capaz de resolver.



```

SUBROUTINE DBOUND.   N = 1   K = -1
NR = 0   NZERO = 0   IOTP =   87   NGP = 1400
E NEW = -1.115472538226461D+03
E OLD = -1.115467092502352D+03   DE = -5.4457D-03
EMIN = -1.52707D+03   EMAX = -1.11547D+03

SUBROUTINE DBOUND.   N = 1   K = -1
NR = 0   NZERO = 0   IOTP =   87   NGP = 1400
E NEW = -1.115472538267359D+03
E OLD = -1.115472538226461D+03   DE = -4.0898D-08
EMIN = -1.52707D+03   EMAX = -1.11547D+03

SUBROUTINE DBOUND.   N = 1   K = -1
NR = 0   NZERO = 0   IOTP =   87   NGP = 1400
E NEW = -1.115472538267358D+03
E OLD = -1.115472538267359D+03   DE = 4.4667D-13
EMIN = -1.11547D+03   EMAX = -1.11547D+03

****  DIRAC EQUATION. POTENTIAL FUNCTION: R*V(R)=Z+ZS*DEXP(-A*R)
      Z=-1.000000E+00, ZS =-5.000000E+01, A= 5.000000E+00
      BOUND STATE: N= 1, K= -1 (EPS= 1.0E-13)
      BINDING ENERGY =-1.115472538267358E+03

SELECT ONE OPTION ...
  1: SCHRODINGER EQUATION. BOUND STATE.
  2: SCHRODINGER EQUATION. FREE STATE.
  3: DIRAC EQUATION. BOUND STATE.
  4: DIRAC EQUATION. FREE STATE.

```

Figura A.5: Finalización de ejecución del código en la que se nos muestra la energía de ligadura del estado ligado junto con los datos introducidos para ello así como la posibilidad de volver a ejecutar el código en cualquiera de los casos resolubles por el mismo.

# Bibliografía

- [1] Harald JW Müller-Kirsten. Introduction to quantum mechanics: Schrödinger equation and path integral, 2006.
- [2] Milton Abramowitz, Irene A Stegun, and Robert H Romer. Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables, 1988.
- [3] Paul R Auvil and Laurie M Brown. The relativistic hydrogen atom: A simple solution. *American Journal of Physics*, 46(6):679–681, 1978.
- [4] F Salvat, JM Fernández-Varea, and W Williamson Jr. Accurate numerical solution of the radial schrödinger and dirac wave equations. *Computer physics communications*, 90(1):151–168, 1995.
- [5] Arthur Erdelyi, W Magnus, F Oberhettinger, and FG Tricomi. Bateman manuscript project. *Higher transcendental functions*, 2:133, 1953.
- [6] Walter Greiner et al. *Relativistic quantum mechanics*, volume 2. Springer, 2000.
- [7] Marius Kolsrud. A new matrix for long and short range potential scattering. Technical report, Oslo Univ.(Norway). Fysisk Inst, 1979.
- [8] Shi-Hai Dong and Zhong-Qi Ma. Exact solutions to the dirac equation with a coulomb potential in  $2+ 1$  dimensions. *Physics Letters A*, 312(1-2):78–83, 2003.
- [9] Sigmund Waldenstro/m. Comment on “a simpler solution of the dirac equation in a coulomb potential,” by bernard goodman and siniša r. ignjatović [am. j. phys. 65 (3), 214–221 (1997)]. *American Journal of Physics*, 66(7):634–634, 1998.
- [10] Xiao-Yan Gu, Zhong-Qi Ma, and Shi-Hai Dong. Exact solutions to the dirac equation for a coulomb potential in  $d+ 1$  dimensions. *International Journal of Modern Physics E*, 11(04):335–346, 2002.
- [11] Shi-Hai Dong. On the dirac equation with a coulomb potential in  $d+ 1$  dimensions. *Physica Scripta*, 67(5):377, 2003.
- [12] Shi-Hai Dong and Guo-Hua Sun. The quantum spectrum of the 2d dirac equation with a coulomb potential: Power series approach. *Physica Scripta*, 69(3):161, 2004.
- [13] Shi-Hai Dong. On the bound states of the dirac equation with a coulomb potential in  $2+ 1$  dimensions. *Physica Scripta*, 67(2):89, 2003.

- [14] Philip M Morse and Herman Feshbach. Methods of theoretical physics. *American Journal of Physics*, 22(6):410–413, 1954.
- [15] William T Vetterling, William T Vetterling, William H Press, William H Press, Saul A Teukolsky, Brian P Flannery, and Brian P Flannery. *Numerical Recipes: Example Book C*. Cambridge University Press, 1992.
- [16] Francesc Salvat and Ricardo Mayol. Accurate numerical solution of the schrödinger and dirac wave equations for central fields. *Computer physics communications*, 62(1):65–79, 1991.
- [17] Se-yuen Mak. Extreme values problems in mechanics without calculus. *American Journal of Physics*, 55(10):929–931, 1987.
- [18] DW Walker. Relativistic effects in low energy electron scattering from atoms. *Advances in Physics*, 20(85):257–323, 1971.
- [19] Sameer M Ikhdair and Ramazan Sever. A systematic study on nonrelativistic quarkonium interaction. *International Journal of Modern Physics A*, 21(19n20):3989–4002, 2006.
- [20] Y Nogami, FM Toyama, and Z Zhao. Nonlinear dirac soliton in an external field. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 28(5):1413, 1995.
- [21] Richard R Silbar and T Goldman. Solving the radial dirac equations: a numerical odyssey. *European journal of physics*, 32(1):217, 2010.
- [22] Antonio Ferrer Soria. *Física nuclear y de partículas*, volume 62. Universitat de València, 2015.
- [23] L Amoroso Rodríguez. Derivación de las ecuaciones de schroedinger y dirac de la ecuación de hamilton-jacobi. *Revista de Ciencia y Tecnología*, 32(1), 2016.
- [24] AR Becerra Becerra. Construcción del límite no relativista para la ecuación de dirac a partir de su solución fundamental. *Bistua: Revista de la Facultad de Ciencias Básicas*, 5(1):67–70, 2007.
- [25] David J Griffiths and Darrell F Schroeter. *Introduction to quantum mechanics*. Cambridge University Press, 2018.
- [26] GF Torres del Castillo and C Uribe Estrada. Solución de la ecuación de dirac en términos de los armónicos esféricos espinoriales. *Revista Mexicana de Física*, 38(1):162–178, 1991.



VNIVERSIDAD  
D SALAMANCA

CAMPUS DE EXCELENCIA INTERNACIONAL



FACULTAD DE CIENCIAS

Los Dres C. Albertus Torres y M Ángeles Pérez García autorizan la presentación de la memoria de Trabajo Fin de Grado en Física titulada "Soluciones a la ecuación de Dirac con un potencial confinante.", presentada por el alumno de 4º curso del Grado en Física **ÁLVARO RODRÍGUEZ MARTÍN** y que ha sido realizada bajo su tutorización durante el curso 2020/2021.

En Salamanca a 2 de julio de 2021

Fdo. C. Albertus Torres

Fdo. M Ángeles Pérez García

SR/A. PRESIDENTE/A DE LA COMISIÓN DEL TRABAJO DE FIN DE GRADO EN .....FÍSICA.....





VNIVERSIDAD  
D SALAMANCA

CAMPUS DE EXCELENCIA INTERNACIONAL



FACULTAD DE CIENCIAS

Los Dres C. Albertus Torres y M Ángeles Pérez García autorizan la presentación de la memoria de Trabajo Fin de Grado en Física titulada "Soluciones a la ecuación de Dirac con un potencial confinante.", presentada por el alumno de 4º curso del Grado en Física **ÁLVARO RODRÍGUEZ MARTÍN** y que ha sido realizada bajo su tutorización durante el curso 2020/2021.

En Salamanca a 2 de julio de 2021

Fdo. C. Albertus Torres

Fdo. M Ángeles Pérez García

SR/A. PRESIDENTE/A DE LA COMISIÓN DEL TRABAJO DE FIN DE GRADO EN .....FÍSICA.....

