Ecuación de Schrödinger

Kevin Cortés G.
Santiago Quintero C.

Universidad de Antioquia
Instituto de Física, FCEN
Física computacional II

Abril de 2022

Ecuación de Schrödinger

Partiendo de la ecuación de autovalores se espera resolver:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \tag{1}$$

Con

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - V$$

donde por lo general se supone al potencial como una función que únicamente depende de las coordenadas espaciales
Así la ecuación a resolver es:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - V(x)\right)\Psi(x) = E\Psi(x) \tag{2}$$

Método numérico

Hacemos una partición del intervalo $[a, b]$ en $N + 1$ partes que nos permite definir las secciones del espacio X_i:

$$x_i = ih + a, \quad i = 0, 1, 2, ...m. \tag{3}$$

donde $h = (b - a)/(N)$
En cada punto del espacio tenemos que:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - V_i \right) \Psi_i = E \Psi_i \tag{4}$$

Método numérico

Al ser el problema unidimensional el operado laplaciano es igual a $\frac{d^2}{dx^2}$ y aplicando el metodo de diferencias finitas se tiene que

Sistema a resolver

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{h^2} + V_i\psi_i = E\psi_i \tag{5}$$

Método numérico

Reescribiendo la ecuación anterior a una forma matricial se tiene que

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{mh^2}+V_1 & -\frac{\hbar^2}{2mh^2} & 0 & \cdots & 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2mh^2} & \frac{\hbar^2}{mh^2}+V_2 & -\frac{\hbar^2}{2mh^2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -\frac{\hbar^2}{2mh^2} & \frac{\hbar^2}{mh^2}+V_{N-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \Psi_{N_1} \end{pmatrix}$$

$$= \mathsf{E} \begin{pmatrix} \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \Psi_{N_1} \end{pmatrix} \quad (6)$$

Empleando el método de valores y vectores propios se hallan las energías E y los estados Ψ_i