metodos computacionales teorico

Punto 6.

a. Considere

$$\frac{d^2y}{dx^2} = -R(x)y + S(x)$$, donde $R(x)$ es una funcion conocida y $S(x)$ es el termino inomoheneo

Aplique el operador $\left[1 + \frac{h^2}{12}\frac{d^2}{dx^2}\right]$

tal que

$$\frac{d^2y}{dx^2} + \frac{h^2}{12}\frac{d^4y}{dx^4} = -R(x)y + S(x) - \frac{h^2}{12}\frac{d^2}{dx^2}R(x)y + \frac{d^2}{dx^2}S(x)\frac{h^2}{12}$$

$\Rightarrow$ donde al expandir y en $(x+h)$ se tiene que

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

Adicionalmente

$$y(x-h) = y(x) - hy^{(1)}(x) + \frac{h^2}{2!}y^{(2)}(x) - \frac{h^3}{3!}y^{(3)}(x) + \frac{h^4}{4!}y^{(4)}(x) - \frac{h^5}{5!}y^{(5)}(x) + O(h$$

de forma que

$$y(x+h) + y(x-h) = 2y(x) + h^2y^{(2)}(x) + \frac{1}{12}h^4y^{(4)}$$

$$\Rightarrow y^{(2)}(x) = \frac{y(x+h) + y(x-h) - 2y(x)}{h^2} - \frac{1}{12}h^2y^{(4)}$$

Remplazando se tiene que:

$\Rightarrow$

$$\left\{-\frac{1}{12}h^2y^{(4)} + \frac{y(x+h) + y(x-h) - 2y(x)}{h^2}\right\} + \frac{h^2}{12}\frac{d^4y}{dx^4} = -R(x)y + S(x) - \frac{h^2}{12}\frac{d^2}{dx^2}R(x)y + \frac{d^2}{dx^2}S(x)\frac{h^2}{12}$$

$$\frac{y(x+h) + y(x-h) - 2y(x)}{h^2} = \left\{\frac{d^2}{dx^2}\frac{h^2}{12}\left[-R(x)y + S(x)\right] - R(x)y + S(x)\right\}$$

aproxime la Segunda derivada de $[-R(x)y(x)+S(x)]$ comó:
derivada

$$\approx \frac{[-R(x+h)y(x+h)+S(x+h)+2R(x)y(x)-2S(x)-R(x-h)y(x-h)+S(x-h)]}{h^2}$$

Al Remplazar y despejar se tiene que

$$\left[1+\frac{h^2}{12}R(x+h)\right]y(x+h)=\left[1-\frac{5h^2}{12}R(x)\right]2y(x)-\left[1+\frac{h^2}{12}R(x-h)\right]y(x-h)$$
$$+\frac{h^2}{12}\left[S(x+h)+10\,S(x)+S(x-h)\right]$$

tome un dominio discreto de nh puntos x equiespaciados de forma que

$$y_n=y(x_n),\quad h=x_n-x_{n-1}$$

$$\Rightarrow \left(1+\frac{h^2}{12}R_{n+1}\right)y_{n+1}=\left(1-\frac{5h^2}{12}R_n\right)2y_n-\left(1+\frac{h^2}{12}R_{n-1}\right)y_{n-1}+\frac{h^2}{12}\left(S_{n+1}+10S_n+S_{n-1}\right)$$

6.B

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

$S(x)=0$

$$\Rightarrow \frac{d^2\varphi}{dx^2}-\frac{2m}{\hbar^2}\varphi[V(x)-E]=0$$

$$R(x)=\frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E]$$

con $V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$

Se tiene que la energía de un oscilador armónico cuántico así

$$E(x)=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\Rightarrow R(x)=\frac{2m}{\hbar^2}\left[\frac{1}{2}(m\omega^2x^2-\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]$$

$$\text{Si } \hbar=m=\omega=1\Rightarrow R(x)=2\left[\frac{1}{2}(x^2-(2n+1)\right]=x^2-2n+1$$

$$y_{n+1} = \frac{2K_1 y_n - K_2 y_{n-1}}{K_3}$$

$$K_1 = \left(1 + \frac{5h^2}{12} R_n\right)$$

R con E_n