Complementos Matemáticos y Numéricos

Máster en Física - 2023/2024

Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo
Algoritmo para aplicara el Método de Crank-Nicolson

1. Estado inicial en $t = 0$: $\psi(x_m)$, donde x_m recorre desde $x_0 = 0$ hasta $x_M = L$
2. Calcular las funciones $\Omega(m, 0)$, $f(m, 0)$, $e(m, 0)$ para todos los m (dimensión en x) empezando con

$$\begin{aligned} \Omega(1,0) &= -\psi(1,0) + \left[2i\lambda + 2(\Delta x)^2 V(1) + 2\right] \psi(1,0) - \psi(0,0) && (1) \\ e(1,n) &= 2 + 2(\Delta x^2)V(1) - 2i\lambda && (2) \\ f(1,n) &= \Omega(1,n) && (3) \end{aligned}$$

   y continuando con:

$$\begin{aligned} \Omega(m,0) &= -\psi(m+1,0) + \left[2i\lambda + 2(\Delta x)^2 V(m) + 2\right] \psi(m,0) - \psi(m-1,0) && (4) \\ e(m,0) &= 2 + 2(\Delta x^2)V(m) - 2i\lambda - \frac{1}{e(m-1,0)} && (5) \\ f(1,0) &= \Omega(1,n) + \frac{f(m-1,0)}{e(m-1,0)} && (6) \end{aligned}$$

3. Ya podemos calcular la evolución de ψ en $t = \Delta t$, para todos los m teniendo en cuenta que ya conocemos $\psi(x_m)$ en $m = M$ por la condición de contorno, así que usamos:

$$\psi(m, n+1) = \frac{\psi(m+1, n+1) - f(m, n)}{e(m, n)} \qquad (7)$$

   empezando por

$$\psi(M-1, n+1) = \frac{\psi(M, n+1) - f(M-1, n)}{e(M-1, n)} = -\frac{f(M-1, n)}{e(M-1, n)} \qquad (8)$$

   ya que $\psi(M, n+1) = 0$, continuando de -1 en -1 hasta llegar a llegando hasta $m = 0$.

4. Repetimos los pasos 2. y 3. n veces hasta llegar al $t = n\Delta t$ deseado.