

Práctica de ordenador 1 Cuántica:

Soluciones numéricas de la Ecuación de Schrödinger

- Ecuación de Schrödinger en una dimensión: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$

Inputs: m, V y E \rightarrow tipo 2 (scattering)

Incógnitas: $\psi(x), E$ (ligados)

- Discretización:

$x \rightarrow l \cdot a$ con $l \in \mathbb{Z}$ (lista) , $a = \frac{2x_{max}}{N-1}$ donde N es el número de puntos con el que he discretizado

- Vamos a reescribir la ecuación en función de nuestra discretización, convirtiéndola ahora en un vector, en una lista de valores $\psi(x) \rightarrow \psi(l)$

$$\psi(l) = \begin{pmatrix} \psi(1) \\ \vdots \\ \psi(N) \end{pmatrix} \iff \psi'(x) = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{\psi(x+a) - \psi(x)}{a} \xrightarrow{\text{chupaza}} \psi''(x) = (\psi'(x))' = \frac{1}{a^2} [\psi(x+a) - \psi(x)] - [\psi(x) - \psi(x-a)] = \frac{1}{a^2} [\psi(x+a) + \psi(x-a) - 2\psi(x)]$$

De forma que ahora nos queda una ecuación matricial:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{a^2} [\psi(x+a) + \psi(x-a) - 2\psi(x)] + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \iff -(\psi_{l+1} + \psi_{l-1} - 2\psi_l) + \tilde{V}_l \psi_l = \tilde{E} \psi_l$$

$x+a \rightarrow l+1$
 $x \rightarrow l$
 $x-a \rightarrow l-1$
 $V(x) \rightarrow V(l)$

$\tilde{E}_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$
 $\frac{V(x)}{\tilde{E}_0} = \tilde{V}_l$
 $\frac{E}{\tilde{E}_0} = \tilde{E}$

Estados Ligados

$M\vec{\psi} = \tilde{E}\vec{\psi}$ Por ejemplo para distintos valores de l :

$$\begin{aligned} l=1 & \quad -(\psi_2 + \psi_0 - 2\psi_1) + \tilde{V}_1 \psi_1 = \tilde{E} \psi_1 \\ l=2 & \quad -(\psi_3 + \psi_1 - 2\psi_2) + \tilde{V}_2 \psi_2 = \tilde{E} \psi_2 \\ l=3 & \quad -(\psi_4 + \psi_2 - 2\psi_3) + \tilde{V}_3 \psi_3 = \tilde{E} \psi_3 \end{aligned}$$

$$\iff \begin{pmatrix} 2+\tilde{V}_1 & 0 & 0 \\ -1 & 2+\tilde{V}_2 & -1 \\ 0 & -1 & 2+\tilde{V}_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \tilde{E} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

matriz tridiagonal

De la matriz tridiagonal obtendremos una función hamiltoniana que diagonalizaremos con métodos numéricos.

Para estados de baja energía, la función es muy suave, es decir, que la función de onda varía muy poco a poco, lo que nos facilita el cálculo numérico. El cálculo para estados de alta energía nos saca del ámbito de validez de nuestros métodos numéricos, lo cual no tiene sentido físico.

Hay un límite para el valor de N , ya que es proporcional a la dimensión de nuestra matriz y la memoria de los ordenadores es limitada.

Usaremos valores de N entre 500 y 1000

Hemos de fijarnos que nuestra función sea cero en los extremos de simulación, ya que representa el infinito.

Estados de Scattering

Proponemos las condiciones de contorno:

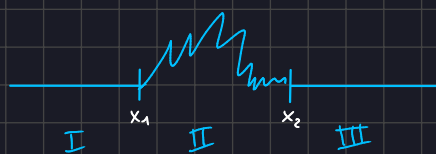
I $\rightarrow \psi(x < x_1) = \frac{1}{t_k} e^{ikx} + \frac{r_k}{t_k} e^{-ikx}$

II $\rightarrow \psi(x_1 < x < x_2) = r_k e^{ikx}$

(El III nos la pega al parecer)

$$-\psi_{l-1} = (\tilde{E} - \tilde{V}_l) \psi_l - 2\psi_l + \psi_{l+1}$$

con $|t_k|^2 + |r_k|^2 = 1$



$$\begin{aligned} |r_k|^2 &= R(E) \\ |t_k|^2 &= T(E) \end{aligned} \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Coeficientes} \\ \text{L.D. } T(E) + R(E) = 1 \end{array} \right.$$