

Cálculo de autovalores para la ecuación de Schroedinger

Elementos de Cálculo Numérico - Segundo Cuatrimestre de 2006

El cálculo de autovalores para la ecuación de Schroedinger independiente del tiempo tiene una gran importancia teórica y práctica. Se proponen en lo que sigue algunas formas simples de calcular los autovalores y autofunciones, que pueden ser fácilmente implementadas en Matlab.

Formalmente, el problema de calcular los autoestados de una partícula en un potencial consiste en hallar las soluciones Ψ_n , y los correspondientes autovalores E_n , del siguiente problema:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + (E - U(x, y, z))\Psi = 0$$

en todo \mathbb{R}^3 o en un dominio Ω con ciertas condiciones de contorno en el borde de Ω . El potencial $U(x, y, z)$ es una función dada de antemano.

i) Conociendo las autofunciones y autovalores del potencial de un oscilador armónico en una dimensión espacial, comparar las soluciones exactas con las soluciones aproximadas calculadas por diferencias finitas. Analizar en particular la dependencia del error en las primeras autofunciones con el paso de la malla de diferencias. Analizar la dependencia del error con el tamaño del dominio elegido. Analizar el error en los autovalores, para una malla fija.

ii) Trate de encontrar las autofunciones por un método de 'corrección de tiro'. Por ejemplo, aprovechando la simetría $x \rightarrow -x$, arranque del origen con valor 1 y derivada cero, para un determinado valor E . Integrando para x mayores, ajuste E de tal modo que la solución se mantenga acotada.

iii) Calcule aproximaciones de los autovalores y autofunciones por el método de Galerkin, con funciones de prueba adecuadas.