

Método de discretización

Juan Pedro Cascales Sandoval y Jose Carlos Gallego Fernández

La discretización es un proceso matemático mediante el cual vamos a obtener resultados aproximados de la ecuación diferencial del problema.

En este caso la ecuación que se nos presenta es la obtenida al aplicar el operador Hamiltoniano (\hat{H}):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + U(x) \cdot \Psi(x) = \hat{H} \cdot \Psi(x) = E \cdot \Psi(x)$$

Como ya hemos explicado antes, se trata de un pozo 'semi-finito' en el que separaremos dos zonas, véase Figura 1.

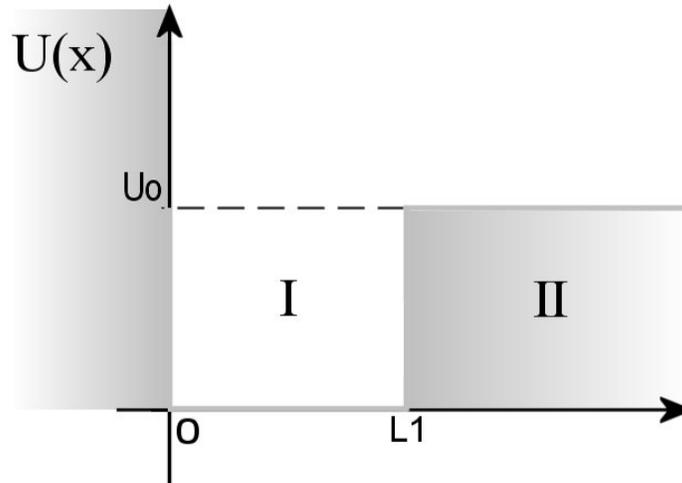


Figura 1: Pozo de potencial semi-finito

Para discretizar vamos a dividir cada una de las zonas en N y M intervalos respectivamente, e iremos analizando la función en esos puntos concretos, véase Figura 2.

El método a seguir se basa en la sustitución de la derivada segunda de la función ($\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2}$) por una expresión que esté en función del valor de $\Psi(x)$ para tres puntos consecutivos:

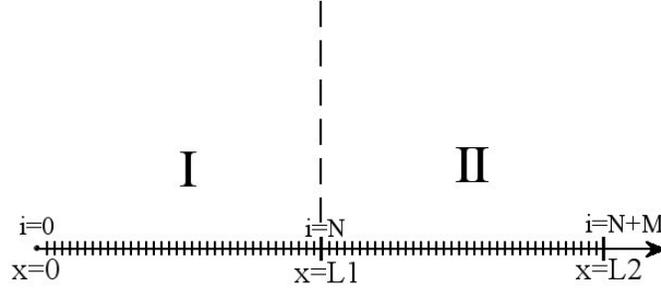


Figura 2: Partición en intervalos

$$\frac{d\Psi(x)}{dx}\Big|_{i+1/2} = \frac{\Psi_{i+1} - \Psi_i}{\Delta x}$$

$$\frac{d\Psi(x)}{dx}\Big|_{i+1/2} = \frac{\Psi_i - \Psi_{i-1}}{\Delta x}$$

Como consecuencia:

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2}\Big|_i = \frac{\frac{d\Psi(x)}{dx}\Big|_{i+1/2} - \frac{d\Psi(x)}{dx}\Big|_{i-1/2}}{\Delta x^2} = \frac{\Psi_{i+1} + \Psi_{i-1} - 2\Psi_i}{\Delta x^2}$$

Si sustituimos esta expresión en la ecuación anterior obtendremos el resultado esperado:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\Psi_{i+1} + \Psi_{i-1} - 2\Psi_i}{\Delta x^2} + U_i \cdot \Psi_i = \hat{H} \cdot \Psi_i = E \cdot \Psi_i$$

Por lo que si despejamos Ψ_{i+1} la obtendremos en función de Ψ_i y Ψ_{i-1} , quedando de este modo:

$$\Psi_{i+1} = 2\Psi_i \cdot \left[1 + (U_i - E)\Delta x^2 \cdot \frac{m}{\hbar^2}\right] - \Psi_{i-1}$$

Las condiciones de contorno también establecen que $U_i = 0$ para $i \in (0, N)$ y que $U(i) = U_0$ para $i \in (N + 1, N + M)$.

De este modo, si damos valores arbitrarios a $\Psi(0)$ y $\Psi(1)$ obtendremos el valor de la función en todo el intervalo mediante el proceso marcado por esta última ecuación. La condición de contorno nos obliga a establecer que $\Psi(0) = 0$, y a $\Psi(1)$ le daremos un valor positivo cualquiera (0.1 en este caso).

Para el cálculo de Ψ_{N+1} deberemos utilizar la condición de que Ψ y su derivada $\frac{d\Psi}{dx}$ sean continuas para $x = L_1$. De esta condición obtenemos las igualdades:

$$\Psi_N^I = \Psi_N^{II}$$

$$\frac{d\Psi_N^I}{dx} = \frac{d\Psi_N^{II}}{dx}$$

Por lo que:

$$\frac{\Psi_N - \Psi_{N-1}}{dx} = \frac{\Psi_{N+1} - \Psi_N}{dx}$$

De donde hallamos $\Psi(N)$. Para hallar los valores de Ψ desde $N+1$ hasta $N+M$ utilizamos el proceso anterior.

De este modo hemos obtenido por discretización una aproximación más o menos precisa de la función de estado sin necesidad de resolución analítica.