



Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

Tutor/a: Rosario González Férez

Departamento y Área de Conocimiento: Física Atómica, Molecular y Nuclear

Correo electrónico: rogonzal@ugr.es

Cotutor/a: Marta Anguiano Millán

Departamento y Área de Conocimiento: Física Atómica, Molecular y Nuclear

Correo electrónico: mangui@ugr.es

Título del Trabajo: Resolución numérica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

Tipología del Trabajo:

(Segun punto 3 de las Directrices del TFG aprobadas por Comisión Docente el 10/12/14)

(Marcar con X)

1. Revisión bibliográfica	X	4. Elaboración de nuevas prácticas de laboratorio	
2. Estudio de casos teórico-prácticos	X	5. Elaboración de un proyecto	
3. Trabajos experimentales		6. Trabajo relacionado con prácticas externas	

Breve descripción del trabajo:

El propósito de este trabajo es discutir algunos métodos numéricos empleados para la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. En primer lugar, se comenzará con una introducción básica a algunos conceptos matemáticos fundamentales sobre ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. Posteriormente, se hará un análisis exhaustivo del modelo explícito, implícito y Crank-Nicolson, siempre en el marco del método de diferencias finitas, además de analizar las características relativas a la precisión y estabilidad de las soluciones. También se darán algunos ejemplos de aplicaciones numéricas a la ecuación clásica de difusión. Finalmente, se emplearán dichos métodos a la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Se elegirán condiciones de contorno tipo Dirichlet para estudiar la evolución temporal de un paquete de ondas gaussiano, aplicando diversos potenciales. En los casos que sea posible, se comparará con la solución analítica.

Objetivos planteados:

1. Estudio de los conceptos matemáticos fundamentales relativos a las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales.
2. Estudio de los algoritmos numéricos de resolución basados en el método de diferencias finitas y aplicación a la ecuación clásica de difusión.
3. Resolución numérica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, usando los algoritmos analizados en la sección anterior.
4. Comparación con la solución analítica.



Metodología:

Una vez estudiados los diferentes algoritmos numéricos de resolución basados en el método de las diferencias finitas, se implementarán en un código realizado en FORTRAN o PYTHON. Se aplicará al problema de la resolución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, usando diferentes potenciales. También se obtendrá analíticamente la solución en los casos en que sea posible.

Bibliografía:

- [1] A. Galindo y P. Pascual. “*Mecánica Cuántica*”. Vol. 1 y 2. Editorial Eudema Universidad. 1989.
- [2] R. Courand, K. Friedrichs and H. Lewy, “*On the partial difference equations of mathematical physics*”. *Mathematische Annalen* Springer, Berlin (1928).
- [3] J. Crank and P. Nicolson, “*A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat conduction type*”, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*. Cambridge University Press, Cambridge (1947).
- [4] H. P. Langtangen, S. Linge, “*Finite Difference Computing with PDEs: A Modern Software Approach*”, Springer International Publishing. Berlin (2017).

A rellenar sólo en el caso que el alumno sea quien realice la propuesta de TFG
Alumno/a propuesto/a:

Granada, 19 de mayo de 2023



UNIVERSIDAD
DE GRANADA



Facultad de Ciencias
Sección de Físicas

Sello del Departamento