

Bài báo nghiên cứu

GIẢI SỐ PHƯƠNG TRÌNH SCHRÖDINGER
BẰNG PHƯƠNG PHÁP MA TRẬN

Nguyễn Gia Huy*, Nguyễn Vũ Thụ Nhân, Nguyễn Lê Anh

Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

*Tác giả liên hệ: Nguyễn Gia Huy – Email: giahuy2005.work@gmail.com

Ngày nhận bài: 21-5-2025; Ngày nhận bài sửa: 09-4-2026; ngày duyệt đăng: 16-4-2026

TÓM TẮT

Nghiên cứu này trình bày việc giải phương trình ma trận Schrödinger sử dụng các ma trận đối xứng 3 đường chéo và 7 đường chéo. Cách tiếp cận này dựa trên khai triển chuỗi Taylor bậc n để tính toán gần đúng đạo hàm bậc hai. Nó được áp dụng để tính toán các trạng thái liên kết và tán xạ trong các bài toán: bài toán chuyển động một hạt trong hố thế vuông hữu hạn sử dụng hệ đơn vị tự nhiên; cấu trúc hạt nhân và trạng thái tán xạ của hệ $n+^{16}\text{O}$ với các tham số vật lý. Các kết quả tính toán số được so sánh với nghiệm giải tích và phương pháp Numerov. Các so sánh cho thấy ma trận đối xứng 7 đường chéo đưa ra độ chính xác tốt hơn đáng kể, đặc biệt là tính toán độ lệch pha cho các trạng thái tán xạ.

Từ khóa: chéo hóa ma trận; phương trình Schrödinger

1. Giới thiệu

Một phiên bản của phương trình Schrödinger lần đầu tiên được giới thiệu trong bài báo năm 1926 (Schrödinger, 1926b) đã đưa Erwin Schrödinger đến với giải Nobel Vật lý vào năm 1933. Kể từ đó, phương trình Schrödinger đã đóng một vai trò quan trọng trong cơ học lượng tử. Nhờ có phương trình này, chúng ta có thể mô tả và tìm hiểu được hành vi của các hạt vi mô trong bức tranh lượng tử (Schrödinger, 1926a). Phương trình Schrödinger được ví như một trụ cột quan trọng của vật lý lượng tử, giống như vai trò của Định luật II Newton trong cơ học cổ điển.

Vì phương trình Schrödinger cho phép chúng ta tìm hiểu hiện tượng xảy ra ở quy mô lượng tử, nên việc giải phương trình Schrödinger đã trở thành một trong những bước quan trọng để tính toán hàm sóng, năng lượng liên kết hay độ lệch pha trong trạng thái tán xạ. Tuy nhiên, bên cạnh các thế tương tác đơn giản như hố thế vuông hay dao động tử điều hòa đã có nghiệm giải tích (Griffiths & Schroeter, 2018), thì việc giải phương trình Schrödinger sẽ gặp thách thức lớn khi đối mặt với những bài toán mà thế tương tác trở nên phức tạp. Do đó,

Cite this article as: Nguyen, G. H., Nguyen, V. T. N., & Nguyen, L. A. (2026). Numerical solution of Schrödinger equation using matrix method. *Ho Chi Minh City University of Education Journal of Science*, 23(4), 966-975. [https://doi.org/10.54607/hcmue.js.23.4.5006\(2026\)](https://doi.org/10.54607/hcmue.js.23.4.5006(2026))

việc phát triển của các phương pháp, công cụ tính toán số là một việc quan trọng, góp phần mở rộng khả năng ứng dụng của cơ học lượng tử trong nhiều lĩnh vực khoa học khác.

Trong những năm qua, vật lý tính toán đã phát triển mạnh mẽ, với nhiều phương pháp giải số đa dạng, có thể kể đến như phương pháp Runge-Kutta (Kutta, 1901; Runge, 1895), phương pháp Numerov (Numerov, 1927), phương pháp phần tử hữu hạn (Bathe & Wilson, 1976; Luong et al., 2022) hay phương pháp ma trận (Okock, 2015). Điểm chung của những phương pháp giải số này là chúng chuyển đổi không gian liên tục của hàm sóng thành hữu hạn các phần tử rời rạc vô cùng bé. Ngày nay, nhờ sức mạnh của máy tính, các chương trình tính toán được sử dụng để tính gần đúng các giá trị hàm sóng, năng lượng, độ lệch pha... Mặc dù không gian được chia nhỏ, nhưng độ chính xác của các phương pháp này vẫn được đảm bảo, nên chúng vẫn có thể áp dụng được cho các dạng thể phức tạp mà ở đó việc tìm nghiệm giải tích của phương trình Schrödinger trở nên không còn khả thi.

Trong các phương pháp giải số trên, phương pháp sử dụng ma trận không quá phức tạp về mặt tính toán và có thể áp dụng được khi Hamiltonian hoặc thế tương tác có thể biểu diễn được dưới dạng ma trận. Phương pháp ma trận đã được áp dụng phổ biến trong các nghiên cứu giải số như giải phương trình Schrödinger (Oghre et al., 2019) hay phương trình Dirac (Alhaidari et al., 2016). Một trong những ưu điểm của phương pháp ma trận trong việc giải phương trình Schrödinger là ta có thể thu được đồng thời các trạng thái liên kết và trạng thái tán xạ. Ngoài ra, phương pháp ma trận còn được đánh giá cao về tính su phạm khi nó có thể được giới thiệu cho các sinh viên toán học, vật lý, hóa học và kỹ thuật (Oghre et al., 2019). Vì những lý do trên, trong nghiên cứu này, chúng tôi đã phát triển phương pháp giải số bằng phương pháp ma trận, mở rộng ma trận đối xứng 3 đường chéo (symmetric tridiagonal matrix – STM) vốn rất phổ biến (Press, 2007) trở thành ma trận đối xứng 7 đường chéo (symmetric heptadiagonal matrix – SHM) bằng khai triển Taylor đến bậc đạo hàm bậc 7 để cải thiện độ chính xác của phương pháp ma trận cho giải số phương trình Schrödinger dừng trong hệ cơ sở tọa độ. Chương trình chéo hóa ma trận sử dụng thư viện LAPACK (Reference-LAPACK, 2025) được áp dụng cho các ma trận STM và SHM để tính toán đồng thời các trạng thái liên kết và trạng thái tán xạ.

Việc sử dụng ma trận có số đường chéo lớn hơn sẽ giúp nâng cao độ chính xác của kết quả tính toán, đặc biệt khi áp dụng cho các thể tương tác phức tạp.

2. Phương pháp tính toán

Sử dụng khai triển Taylor đến bậc 7 cho hàm số $f(x)$ tại 6 điểm lân cận của x_0 là $x_0 - 3h, x_0 - 2h, \dots, x_0 + 3h$ để tính gần đúng đạo hàm cấp 2 của hàm $f(x)$ tại điểm x_0 cho trước. Một khai triển đầu tiên là

$$f(x_0 - 3h) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} (-3h)^n \tag{1}$$

$$\cong f(x_0) + (-3h)f^{(1)}(x_0) + \frac{(-3h)^2}{2} f^{(2)}(x_0) + \dots + \frac{(-3h)^7}{7!} f^{(7)}(x_0).$$

Tiếp tục thực hiện khai triển cho các lân cận còn lại như khai triển (1), chúng ta thu được các số hạng $h^k f_0^{(k)}$, với $f_0^{(k)}$ là đạo hàm bậc k của $f(x)$ tại x_0 như trong Bảng 1.

Bảng 1. Hệ số của $h^k f_0^{(k)}$ trong các khai triển

để tính gần đúng đạo hàm cấp hai của $f(x)$ tại x_0

	f_0	$hf_0^{(1)}$	$h^2 f_0^{(2)}$	$h^3 f_0^{(3)}$	$h^4 f_0^{(4)}$	$h^5 f_0^{(5)}$	$h^6 f_0^{(6)}$	$h^7 f_0^{(7)}$
$x_0 - 3h$	1	-3	9/2	-9/2	27/8	-81/40	81/80	-243/560
$x_0 - 2h$	1	-2	2	-4/3	2/3	-4/15	4/45	-8/351
$x_0 - h$	1	-1	1/2	-1/6	1/24	-1/120	1/720	-1/5040
$x_0 + h$	1	1	1/2	1/6	1/24	1/120	1/720	1/5040
$x_0 + 2h$	1	2	2	4/3	2/3	4/15	4/45	8/351
$x_0 + 3h$	1	3	9/2	9/2	27/8	81/40	81/80	243/560

Giả sử chúng ta cần nhân vào khai triển của $f(x_0 - 3h)$ hệ số a_1 , vào khai triển của $f(x_0 - 2h)$ hệ số a_2, \dots để khi cộng 6 khai triển lại, ngoại trừ số hạng f_0 và $h^2 f_0^{(2)}$ vẫn được giữ lại, các hệ số khác đều bị triệt tiêu. Lúc này, chúng ta có được phương trình ma trận (2) như sau

$$\begin{pmatrix} -3 & -2 & -1 & 1 & 2 & 3 \\ -\frac{9}{2} & -\frac{4}{3} & -\frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{4}{3} & \frac{9}{2} \\ \frac{27}{8} & \frac{2}{3} & \frac{1}{24} & \frac{1}{24} & \frac{2}{3} & \frac{27}{8} \\ -\frac{81}{40} & -\frac{4}{15} & -\frac{1}{120} & \frac{1}{120} & \frac{4}{15} & -\frac{81}{40} \\ \frac{81}{80} & \frac{4}{45} & \frac{1}{720} & \frac{1}{720} & \frac{4}{45} & \frac{81}{80} \\ -\frac{243}{560} & -\frac{8}{351} & -\frac{1}{5040} & \frac{1}{5040} & \frac{8}{351} & \frac{243}{560} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \\ a_6 \end{pmatrix} = 0. \tag{2}$$

Phương trình (2) có vô số bộ nghiệm $\{a_1, a_2, \dots, a_6\}$. Tuy nhiên, để thuận tiện cho tính toán, chúng ta có thể chọn các nghiệm: $a_1 = a_6 = 2$; $a_2 = a_5 = -27$ và $a_3 = a_4 = 270$.

Với các hệ số đã chọn, chúng ta tiến hành nhân các hệ số đó với từng khai triển tương ứng và cộng vế với vế của 6 khai triển với nhau, chúng ta sẽ thu được gần đúng đạo hàm cấp 2 của $f(x)$ tại x_0 là

$$f''(x_0) \cong \frac{2f_{-3} - 27f_{-2} + 270f_{-1} - 490f_0 + 270f_1 - 27f_2 + 2f_3}{180h^2}, \tag{3}$$

với $f_k \equiv f(x_0 + kh)$.

Các ma trận STM trong (7) và ma trận SHM trong (6) được chéo hóa sử dụng thư viện giải số cho đại số tuyến tính LAPACK (Reference-LAPACK, 2025). Và thuật toán Lanczos được sử dụng để giảm thời gian chéo hóa ma trận SHM (Lanczos, 1950). Trong nghiên cứu này, dạng hồ thế vuông được lựa chọn khi khảo sát. Các kết quả nghiệm số được so sánh trực tiếp với nghiệm giải tích.

3. Kết quả và thảo luận

3.1. Tính toán trạng thái liên kết với hồ thế vuông hữu hạn trong hệ đơn vị tự nhiên

Bài toán hồ thế vuông hữu hạn có độ sâu $V_0 = 5$ và độ rộng $r_0 = 1$ được sử dụng. Năng lượng liên kết giải tích tìm được là $E_B = -2.312097$ thu được từ nghiệm của phương trình

$$\tan\left[r_0\sqrt{2(E+V_0)}\right] = -\sqrt{-\frac{E+V_0}{E}}. \tag{8}$$

Bảng 2 trình bày các kết quả tính toán năng lượng liên kết và sai số tỉ đối tương ứng khi so với nghiệm giải tích sử dụng phương pháp chéo hóa STM và SHM. Ta có thể thấy phương pháp SHM có độ chính xác cao hơn so với phương pháp STM. Cụ thể, khi sử dụng kích thước ma trận $N = 1000$ và $N = 2000$ với khoảng chia $h = 0.004$, phương pháp SHM cho sai số nhỏ nhất. Điều này cho thấy, việc mở rộng ma trận STM thành SHM cải thiện được kết quả tính toán của phương pháp ma trận.

Bảng 2. Năng lượng liên kết tính toán được bằng phương pháp SHM và STM.

Nghiệm giải tích chính xác là $E_B = -2.312097$ (đơn vị tự nhiên)

N	h	$E_B^{(SHM)}$	$\delta_{E_B}^{(SHM)}$ (%)	$E_B^{(STM)}$	$\delta_{E_B}^{(STM)}$ (%)
1000	0.005	-2.319539	0.3219	-2.321294	0.3978
1000	0.004	-2.318046	0.2573	-2.319447	0.3179
1000	0.003	-2.323583	0.4968	-2.324632	0.5422
2000	0.005	-2.319539	0.3219	-2.321295	0.3978
2000	0.004	-2.318050	0.2575	-2.319451	0.3181
2000	0.003	-2.323871	0.5092	-2.324915	0.5544

Độ lệch pha giải tích trong bài toán hồ thế vuông hữu hạn được cho bởi biểu thức (Canto & Hussein, 2013)

$$\delta_\ell = \tan^{-1} \frac{l_1 j_\ell(l_2 r_0) j_{\ell+1}(l_1 r_0) - l_2 j_\ell(l_1 r_0) j_{\ell+1}(l_2 r_0)}{l_1 j_\ell(l_2 r_0) n_{\ell+1}(l_1 r_0) - l_2 n_\ell(l_1 r_0) j_{\ell+1}(l_2 r_0)}, \tag{9}$$

với $l_1 \equiv \sqrt{2E}$ và $l_2 \equiv \sqrt{2(E+V_0)}$ là các biến được đặt để thuận tiện cho tính toán. Và j_ℓ và n_ℓ lần lượt là hàm Bessel cầu bậc ℓ và hàm Neumann cầu bậc ℓ được xác định bởi (Griffiths & Schroeter, 2018)

$$j_\ell(x) = (-x)^\ell \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^\ell \frac{\sin x}{x}, \quad n_\ell(x) = -(-x)^\ell \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^\ell \frac{\cos x}{x}. \tag{10}$$

Kết quả tính toán độ lệch pha từ hai phương pháp STM và SHM được trình bày ở Hình 1 và các số liệu kèm theo phương sai tương ứng được thể hiện ở Bảng 3 và 4. Trong đó, phương sai được tính bằng công thức

$$\chi^2 = \frac{1}{N_{E_+}} \cdot \sum_{i=1}^{N_{E_+}} (\delta_{\text{num}}(E_i) - \delta_{\text{ana}}(E_i))^2, \tag{11}$$

với N_{E_+} là số giá trị năng lượng tán xạ rời rạc tìm được bằng phương pháp ma trận. Nếu không có năng lượng liên kết thì $N_{E_+} = N$, nếu có năng lượng liên kết thì $N_{E_+} = N - N_{E_-}$.

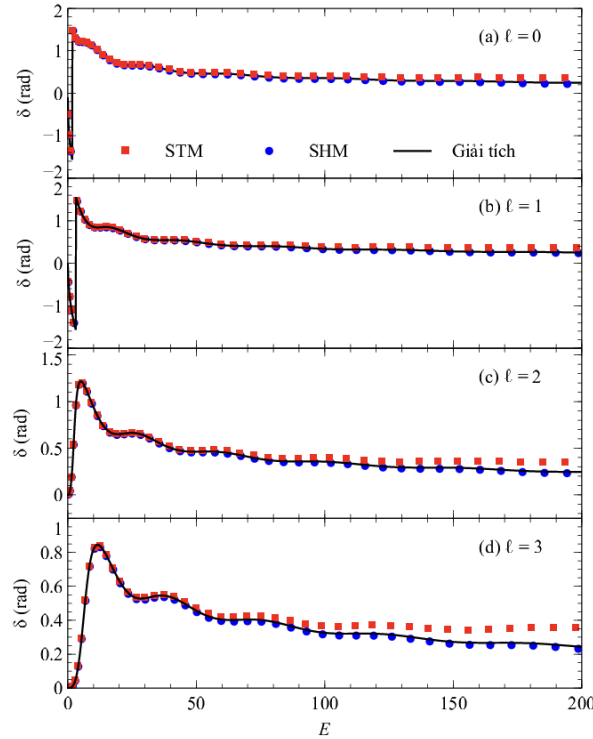
Bảng 3. Phương sai của độ lệch pha hàm sóng tìm được bằng phương pháp SHM và STM với kích thước ma trận $N = 1000$, số lượng tử quỹ đạo $\ell = 0$ và một số khoảng chia h khác nhau

h	$\chi^2_{(\text{SHM})}$	$\chi^2_{(\text{STM})}$
0.004	0.59584	0.77873
0.005	0.59597	0.77907
0.006	0.59596	0.77958
0.007	0.59592	0.78008

Bảng 4. Phương sai của độ lệch pha hàm sóng tìm được bằng phương pháp SHM và STM với kích thước ma trận $N = 1000$, khoảng chia $h = 0.007$ và một số số lượng tử quỹ đạo ℓ khác nhau

ℓ	$\chi^2_{(\text{SHM})}$	$\chi^2_{(\text{STM})}$
0	0.59592	0.78008
1	0.57900	0.76786
2	0.60495	0.78910
3	0.58099	0.77642

So với phương pháp giải số bằng phương pháp STM, phương pháp dùng SHM cho kết quả tính toán độ lệch pha tốt hơn, đặc biệt ở những vùng có năng lượng lớn. Bên cạnh đó, trong các bài toán có số lượng tử quỹ đạo $\ell \neq 0$ và khoảng chia không gian h được tăng lên, thì phương pháp SHM vẫn duy trì được độ chính xác cao và tính ổn định hơn so với phương pháp STM. Điều này phù hợp với kì vọng của chúng ta khi mở rộng ma trận sẽ mang lại kết quả tính toán tốt hơn. Do sự khác biệt nhiều về kết quả độ lệch pha của hai phương pháp khi tính toán những bài toán phức tạp $\ell \neq 0$ hay khoảng chia lớn (để giảm thời gian tính toán), thì phương pháp SHM là một lựa chọn tối ưu hơn, do phương pháp này có khả năng duy trì tính ổn định và độ chính xác trong các bài toán khác nhau.



Hình 1. Độ lệch pha của hàm sóng tìm được bằng phương pháp STM và SHM so với độ lệch pha giải tích ở biểu thức (9) với $N = 1000$, $h = 0.007$ và một số số lượng tử quỹ đạo l khác nhau: (a) $l = 0$, (b) $l = 1$, (c) $l = 2$, (d) $l = 3$

3.2. Tính toán trạng thái liên kết và tán xạ của hệ hạt nhân $n+^{16}\text{O}$ với dạng thế Woods-Saxon

Phương trình Schrödinger cho hệ hạt nhân $n+^{16}\text{O}$ là

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) \right] u(r) = Eu(r), \tag{12}$$

trong đó, chúng tôi xét thế Woods-Saxon có dạng

$$V_{\text{cent.}}(r) = -\frac{V_0}{1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right)}. \tag{13}$$

Ở phương trình (13), R được tính dựa trên công thức $R = r_0 \cdot A^{1/3}$ (fm) với A là số khối của hạt nhân ^{16}O được lấy gần đúng $A = 16$ và $r_0 = 1.2$ fm khi đó $R = 3.024$ fm. Và chọn $a = 0.6$ fm. Ngoài ra, độ sâu V_0 được chọn để mô tả lại năng lượng liên kết của neutron ở mức $1d_{5/2}$ trong cấu trúc hạt nhân ^{17}O . Để mô tả lại năng lượng liên kết $E_B = -4.143$ MeV ở mức $1d_{5/2}$, chúng tôi đã sử dụng phương pháp giải số Numerov để xác định độ sâu V_0 và tìm được $V_0 = -61.865$ MeV.

Chúng tôi xét hệ hạt nhân gồm một neutron hóa trị ở mức năng lượng $1d_{5/2}$ (tương ứng với $l = 2$) liên kết với lõi ^{16}O ở trạng thái cơ bản (0^+). Bảng 5 trình bày kết quả tính toán năng lượng

liên kết của hệ và độ lệch tỉ đối khi so sánh với phương pháp Numerov. Bảng 5 cho thấy kết quả của SHM lệch ít hơn STM khi so sánh với phương pháp Numerov trong các trường hợp. Điều này cho thấy độ tin cậy của phương pháp ma trận được sử dụng trong nghiên cứu này, chỉ ra khi thêm các tham số Vật lý cụ thể vào tính toán, độ chính xác của kết quả không bị ảnh hưởng.

Bảng 5. Năng lượng liên kết tính toán được bằng phương pháp SHM và STM với kích thước ma trận $N = 1000$ và một số khoảng chia h khác nhau. Năng lượng liên kết Numerov là $E_{B \text{ Numerov}} = -4.143253 \text{ MeV}$

h (fm)	$E_B^{(SHM)}$ (MeV)	$\delta_{E_B}^{(SHM)}$ (%)	$E_B^{(STM)}$ (MeV)	$\delta_{E_B}^{(STM)}$ (%)
0.015	-4.143304	0.00124	-4.143485	0.00561
0.016	-4.143343	0.00217	-4.143549	0.00713
0.017	-4.143358	0.00253	-4.143590	0.00814
0.018	-4.143364	0.00268	-4.143624	0.00896
0.019	-4.143367	0.00274	-4.143657	0.00974
0.020	-4.143368	0.00276	-4.143689	0.01052

Chúng tôi tiếp tục so sánh kết quả tính toán độ lệch pha của phương pháp SHM và STM so với phương pháp Numerov. Bảng 6 thể hiện độ lệch tỉ đối của 10 giá trị độ lệch pha đầu tiên tìm được bằng phương pháp SHM và STM so với phương pháp Numerov. Tương tự với bài toán thế vuông, độ lệch pha tìm được bằng SHM cho kết quả khớp với phương pháp Numerov tốt hơn và ổn định hơn so với STM.

Bảng 6. Độ lệch tỉ đối của độ lệch pha hàm sóng sử dụng các phương pháp STM và SHM so với Numerov ở 10 mức năng lượng đầu tiên. Với kích thước ma trận $N = 1000$ và khoảng chia $h = 0.015 \text{ fm}$

E	$\delta_{\delta}^{(STM)}$ (%)	$\delta_{\delta}^{(SHM)}$ (%)
3.39	0.89	0.92
8.72	0.18	0.17
16.25	0.09	0.07
25.93	0.07	0.04
37.77	0.06	0.02
51.76	0.07	0.02
67.84	0.08	0.01
85.99	0.09	0.01
106.14	0.10	0.01
128.29	0.13	0.01

Như vậy, thông qua việc khảo sát trạng thái liên kết và tán xạ của hệ hạt nhân $n+^{16}\text{O}$ với thế Woods-Saxon, chúng ta có thể thấy rằng việc mở rộng ma trận từ STM thành SHM sẽ cho kết quả tính toán tốt về năng lượng liên kết và có sự cải thiện đáng kể về độ lệch pha.

4. Kết luận

Ở nghiên cứu này, chúng tôi đã phát triển phương pháp giải số phương trình Schrödinger bằng phương pháp ma trận thông qua việc xây dựng SHM bằng cách sử dụng khai triển Taylor đến đạo hàm bậc 7. Phương pháp này cho kết quả năng lượng liên kết và độ lệch pha tốt hơn so với phương pháp sử dụng STM. Trong đó, độ chính xác được cải thiện đáng kể khi tính toán độ lệch pha của hàm sóng ở trạng thái tán xạ, đặc biệt ở những trường hợp mà số lượng tử quỹ đạo ℓ khác 0, hay ở vùng mà năng lượng tán xạ lớn đối với hạt chuyển động trong hố thế vuông hữu hạn. Phương pháp này là một công cụ hữu ích trong việc nghiên cứu nhất quán các trạng thái tán xạ và liên kết.

- ❖ **Tuyên bố về quyền lợi:** Các tác giả xác nhận hoàn toàn không có xung đột về quyền lợi.
- ❖ **Lời cảm ơn:** Nghiên cứu này được tài trợ bởi Quỹ Phát triển khoa học và công nghệ Quốc gia (NAFOSTED) trong đề tài mã số 103.04-2025.07.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Alhaidari, A. D., Bahlouli, H., & Assi, I. A. (2016). Solving Dirac equation using the tridiagonal matrix representation approach. *Physics Letters A*, 380(18), 1577–1581. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.physleta.2016.03.001>
- Bathe, K. J., & Wilson, E. L. (1976). *Numerical Methods in Finite Element Analysis*. Prentice-Hall.
- Canto, L. F., & Hussein, M. S. (2013). *Scattering theory of molecules, atoms, and nuclei*. World Scientific. <https://doi.org/https://doi.org/10.1142/8012>
- Griffiths, D. J., & Schroeter, D. F. (2018). *Introduction to Quantum Mechanics* (3rd ed.). Cambridge University Press.
- Kutta, W. (1901). *Beitrag zur näherungsweise Integration totaler Differentialgleichungen*. Teubner.
- Lanczos, C. (1950). An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, 45(4), 255–282.
- Luong, L. H., Luu, K. L., Nguyen, M. N., & Gusev, A. A. (2022). Calculation of metastable states in scattering and eigenvalue problems for complex potential barrier. *Ho Chi Minh City University of Education Journal of Science*, 19(10), 1599–1610. <https://doi.org/https://doi.org/10.54607/hcmue.js.19.10.3474>
- Numerov, B. (1927). Note on the numerical integration of $d^2x/dt^2 = f(x,t)$. *Astronomische Nachrichten*, 230(19), 359–364. <https://doi.org/https://doi.org/10.1002/asna.19272301903>
- Oghre, E. O., Taiwo, T. J., & Njah, A. N. (2019). Solution of the Schrödinger Equation Using Tridiagonal Representation Approach in Nonrelativistic Quantum Mechanics: A Pedagogical Approach. *Transactions of the Nigerian Association of Mathematical Physics*, 8, 31–52.

- Okock, P. O. (2015). A matrix method of solving the Schrodinger equation. *African Institutes of Mathematical Sciences., Tanzania.*
- Press, W. H. (2007). *Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing.* Cambridge University Press.
- Reference-LAPACK. (2025). *LAPACK - Linear Algebra PACKage.* <https://github.com/Reference-LAPACK/lapack>
- Runge, C. (1895). Über die numerische Auflösung von Differentialgleichungen. *Mathematische Annalen*, 46(2), 167–178.
- Schrödinger, E. (1926a). An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules. *Physical Review*, 28(6), 1049.
- Schrödinger, E. (1926b). Quantisierung als Eigenwertproblem: Erste Mitteilung. *Annalen Der Physik*, 79, 361–376.

**NUMERICAL SOLUTION OF SCHRÖDINGER EQUATION
USING MATRIX METHOD**

Nguyen Gia Huy**, *Nguyen Vu Thu Nhan*, *Nguyen Le Anh

Ho Chi Minh City University of Education, Vietnam

**Corresponding author: Nguyen Gia Huy – Email: giahuy2005.work@gmail.com*

Received: May 21, 2025; Revised: April 09, 2026; Accepted: April 16, 2026

ABSTRACT

This study presents a numerical method for solving the matrix Schrödinger equation using symmetric tridiagonal and heptadiagonal matrices. The approach is based on the n-th order Taylor series expansion to approximate second-order derivatives. It is applied to investigate both bound and scattering states in two cases: a one-body problem with a square well potential using natural units, and the nuclear structure and scattering of the $n+^{16}\text{O}$ system with physical parameters. The numerical results are compared with analytical solutions and those obtained using the Numerov method. These comparisons demonstrate that the symmetric heptadiagonal matrix offers higher accuracy, particularly in calculating phase shifts for scattering states.

Keywords: matrix diagonalization; Schrödinger equation