

# Pre-Pràctica 8: Runge Kutta. 23-24

Objectius: [Resolució de EDOs, Runge-Kutta4, mètode del tir, Estats lligats](#)

— Nom del programa **P8-23-24.f90**.

Resoldrem l'equació d'Schrödinger independent del temps per trobar els autovalors i autovectors d'una partícula en una caixa 1D de mida  $L$ .

$$-\frac{1}{2}\partial_x^2\phi(x) + V(x)\phi(x) = E\phi(x) \quad \text{amb } x \in [0, 1] \quad \text{i} \quad \phi(0) = \phi(1) = 0$$

on les  $x$  estan en unitats d' $L$  i les energies en unitats de  $\hbar^2/(mL^2)$ . El potencial es constant:  $V(x) = -2.4$ .

- 1) Escriu una subrutina general **RungeKutta4order(dx,funcin,dfuncout,nequs,edofuncio)** que calculi un pas del mètode de Runge-Kutta 4, per a un sistema de **nequs** equacions de primer ordre acoblades. L'estructura inicial de la subrutina ha de ser,

```
SUBROUTINE RungeKutta4order(DX,funcin,dfuncout,nequs,edofuncio)
  INTEGER NEQUS
  DOUBLEPRECISION funcin(NEQUS),dfuncout(NEQUS)
```

on **edofuncio** haurà d'estar definida com a external.

- 2) Escriu una subrutina **EDO(nequ,x,yinput,dyoutput)**, que donat  $x$ , i un vector **yinput**, torna el valor de  $dyinput/dx$  dins del vector **dyoutput**.

```
SUBROUTINE EDO(NEQU,X,YINPUT,DYOUTPUT)
  DOUBLE PRECISION X,YINPUT(NEQU),DYOUTPUT(NEQU)
```

Escriu la subrutina especialitzada per a l'equació a resoldre.

- 3) Programa un mètode de tir per trobar l'estat fonamental i primer estat excitat de la partícula dins de la caixa. L'algorisme consta de quatre passos, els dos primers són per a començar el mètode de la secant per buscar  $\phi_E(1) = 0$ , on  $\phi_E(x)$  és la solució de l'equació per energia  $E$ :

- a) Considera dos valors de l'energia  $E_1$  i  $E_2$  (diferents però propers).
- b) Integra l'equació d'Schrödinger començant per  $\phi(0) = 0$  i  $\phi'(0) = 0.15$  fins al punt  $x = 1$ , obtenint  $\phi_{E_1}(1)$  i  $\phi_{E_2}(1)$ , respectivament.
- c) Considera la nova energia,

$$E_3 = \frac{E_1\phi_{E_2}(1) - E_2\phi_{E_1}(1)}{\phi_{E_2}(1) - \phi_{E_1}(1)} \quad (0.25)$$

i torna a resoldre l'equació fins a  $x = 1$ .

- d) Si  $|\phi_{E_3}(1)| < 10^{-5}$  considerem que hem convergit, si no, tornem a c) amb  $E_2 \rightarrow E_1$  i  $E_3 \rightarrow E_2$ .

- 4) Obtingues els quatre primers autovalors i autovectors. Normalitza els autovectors,  $\int_0^1 |\phi(x)|^2 dx = 1$ . Escriu en un arxiu **P8-23-24-res.dat** els valors d' $E$  per a cada pas de la secant pels quatre autovalors. Genera una figura **P8-23-24-fig.png** amb els quatre autovectors normalitzats comparant-los amb la solució exacta. Compara els resultats obtinguts amb 20 i 400 passos per integrar l'equació.

Entregable: [P8-23-24.f90,P8-23-24-res.dat,P8-23-24-fig.png](#)