

Pràctica 8: Autovalors i autovectors d'un potencial de pou finit. 23-24

Objectius: [Eq. Schrödinger](#), resolució de EDOs, Runge-Kutta, 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'un electró en un potencial 1D,

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\partial_x^2\phi(x) + V(x)\phi(x) = E\phi(x) \quad (0.26)$$

amb $V(x) = \tilde{V}(x) \equiv V_0 \sinh(\alpha/\delta)/(\cosh(\alpha/\delta) + \cosh(x/\delta))$, on $\hbar^2/(m_e) = 7.6199 \text{ eV } \text{\AA}^2$, $V_0 = -20 \text{ eV}$, $\delta = 0.05 \text{ \AA}$ i $\alpha = 2 \text{ \AA}$. Treballa en unitats: \AA , eV, per a les distàncies i energies, respectivament. Utilitza el mètode d'integració desenvolupat a la prepràctica.

- 1) Considera $E_1 = -21 \text{ eV}$, $E_2 = -20.5 \text{ eV}$, $E_3 = -14 \text{ eV}$ i $E_4 = -13 \text{ eV}$. Obtingues les solucions corresponents per a l'equació diferencial amb la condició inicial, $\phi(x_0) = 0 \text{\AA}^{-1/2}$ i $\phi'(x_0) = 2 \times 10^{-6} \text{\AA}^{-3/2}$.

Per integrar l'equació d'Schrödinger fes servir una caixa de longitud $L = 8 \text{\AA}$, començant amb $x_0 = -L/2$. Integra l'equació amb 400 passos des de $x = -L/2$ fins a $x = L/2$.

Fes una figura mostrant les solucions $\phi_{E_1}(x)$, $\phi_{E_2}(x)$, $\phi_{E_3}(x)$ i $\phi_{E_4}(x)$ mostrant-les només a l'interval $x \in [-L/2 : L/14]$ (sense normalitzar), **P8-23-24-fig1.png**.

- 2) Amb el mateix procediment que a la pre-pràctica i fent servir les mateixes condicions que a 1) per integrar l'equació:

- a) Programa un mètode de tir per a trobar els tres primers autovalors del sistema. Comença dels valors E_1 i E_2 d'a) pel primer autovalor, d' E_3 i E_4 d'a) pel segon i d' $E_5 = -8 \text{ eV}$ i $E_6 = -7.5 \text{ eV}$ pel tercer. Atura el càlcul quan es satisfaci la condició de contorn, $|\phi(x_0 + L)| < 10^{-6} \text{\AA}^{-1/2}$. Fes una figura mostrant la convergència del mètode, mostrant el valor de l'energia a cada iteració pels 3 autovalors, **P8-23-24-fig2.png**.

- b) Calcula els autovectors, $\phi(x)$, corresponents als autovalors de l'apartat a). Fes una figura mostrant els tres autovectors normalitzats a l'espai considerat:

$$\int_{-L/2}^{L/2} |\phi(x)|^2 dx = 1, \text{ P8-23-24-fig3.png.}$$

- 3) Considera l'efecte d'una pertorbació, de tal manera que el potencial sigui, $V(x) = \tilde{V}(x) + \beta x^2$.

- a) Estudia com canvia l'autovector d'energia més baixa (estat fonamental) amb $\beta = 0, 1, 5 \text{ eV } \text{\AA}^{-2}$. Fes una figura comparant l'estat fonamental normalitzat calculat amb els diferents valors de β , **P8-23-24-fig4.png**.
- b) Escriu en un arxiu **P8-23-24-res1.dat** la probabilitat de trobar a l'electró en la regió $x \in [-1.3 : 1.3] \text{ \AA}$ pels tres valors de β .

Entregable: **P8-23-24.f90**, **P8-23-24-fig1.png**, **P8-23-24-fig2.png**, **P8-23-24-fig3.png**, **P8-23-24-fig4.png**, **P8-23-24-res1.dat**, scripts gnuplot