

# Pràctica 8: Autovalors i autovectors d'un potencial a la Wood-Saxon. 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 de Pöschl-Teller,

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \partial_x^2 \phi(x) + V(x)\phi(x) = E\phi(x) \quad (0.27)$$

amb  $V(x) = \tilde{V}(x) \equiv V_0 \sinh(2)/(\cosh(2) + \cosh(x/\delta))$ , on  $\hbar^2/(2m_e) = 3.80995 \text{ eV } \text{\AA}^2$ ,  $V_0 = -50 \text{ eV}$ , i  $\delta = 0.4 \text{ \AA}$ . Treballa en unitats:  $\text{\AA}$ , eV, per a les distàncies i energies, respectivament. Utilitza el mètode d'integració desenvolupat a la prepràctica.

- 1) Considera  $E_1 = -31 \text{ eV}$ ,  $E_2 = -30 \text{ eV}$ ,  $E_3 = -14 \text{ eV}$  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  $L = 14 \text{ \AA}$ , 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' $E_5 = -4 \text{ eV}$  i  $E_6 = -3.5 \text{ eV}$  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 anharmonicitat d'ordre quart, de tal manera que el potencial confinant sigui,  $V(x) = \tilde{V}(x) + \beta \sin(x/\xi)$ , amb  $\xi = 1 \text{ \AA}$ .

- a) Estudia com canvia l'autovector d'energia més baixa (estat fonamental) amb  $\beta = 0, 5, 15 \text{ eV}$ . Fes una figura comparant l'estat fonamental normalitzat calculat amb els diferents valors de  $\beta$ , **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  $x \in [-\delta : \delta]$  pels tres valors de  $\beta$ .

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