Setmana 1Apr - 8Apr

- **UNITATS.** Per tal que els valors utilitzats siguin del ordre d'un ordre acceptable, $10^{-1} \sim 10^2$, el factor $m \equiv massa/\hbar^2$ ha de ser d'aquest ordre. Per a tal fí, es canvíen les unitats fins a aconseguir-ho. Els resultats són els següents:

Energia	eV
Temps	fs
(factor) m	$eV^{-1}Å^{-2}$
Longituds	Å

Taula 1: Unitats de les diferents magnituds.

- **Eigenparam.** Comprovació (positiva) que la suma de les components al quadrat dels evect donats per eigh = 1 (per al ús de la fòrmula dels trapezis).

- **Eigenparam** Comprovació de si els autovalors i vectors obtingus per eigenparam són efectivament solució de l'eq. d'Schrödinger ind. del temps (cas d'un electrò i un potencial harmònic junt amb una gaussiana).

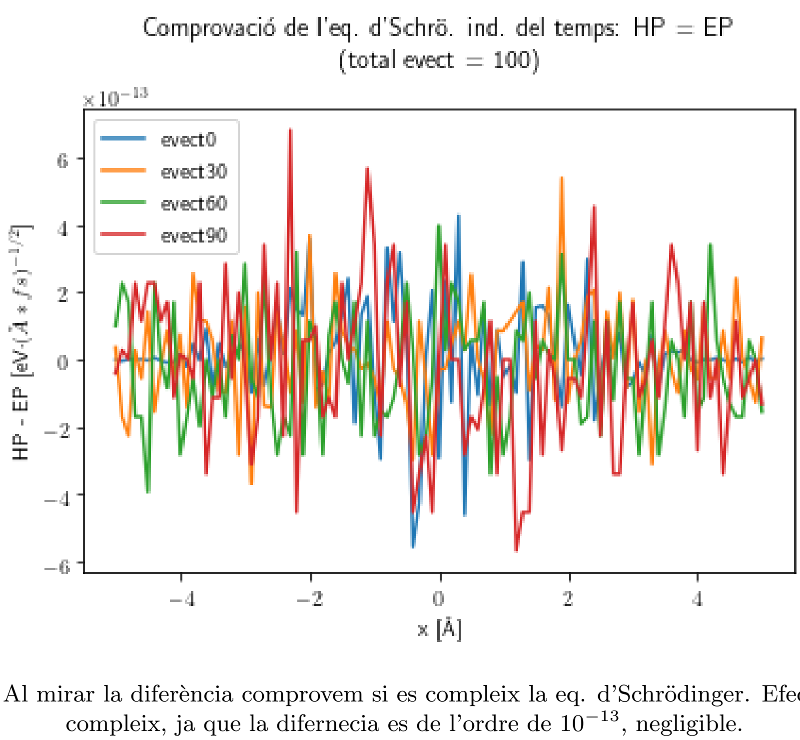


Figura 1: Al mirar la diferència comprovem si es compleix la eq. d'Schrödinger. Efectivament es compleix, ja que la difernecia es de l'ordre de 10^{-13}, negligible.

- **Comp.** Amb aquesta subrutina obtenim les components del vector donat en la base donada. Per comprovar.ho, sumem la combinació que teòricament dona la funciço d'ona original i comparem els resultats. Les unitats de Ψ són $\text{Å}^{-1/2} fs^{-1/2}$.

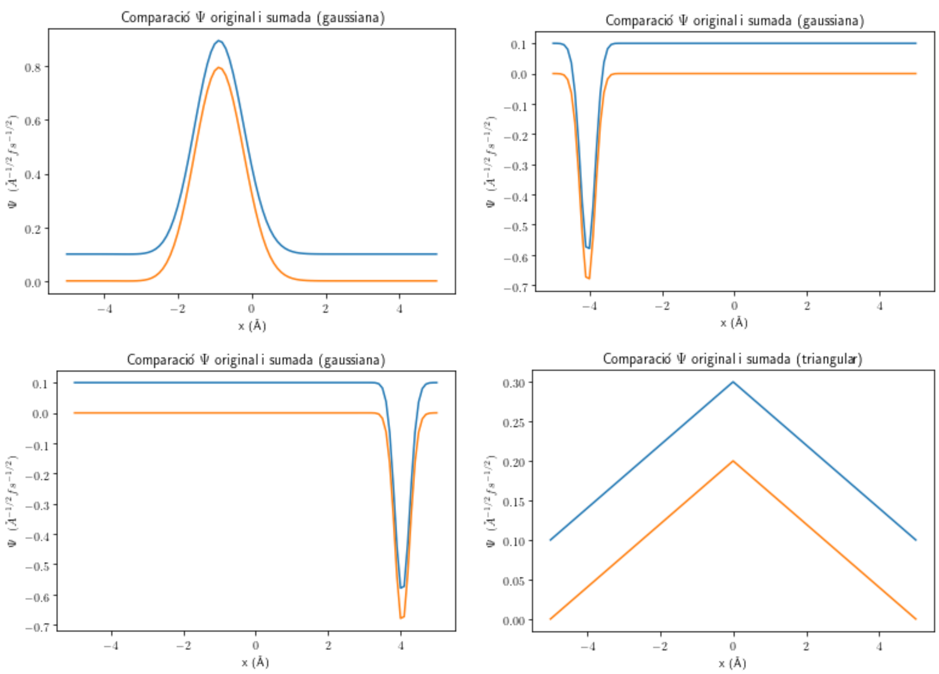


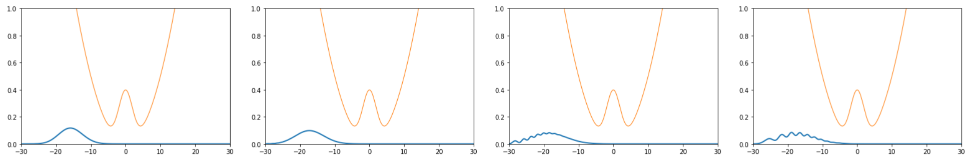
Figura 2: Funció d'ona original (blau) i la sumada (taronja). La original ha estat desplaçada +0.1 (en unitats de Ψ). *Per si no es veu el títol, les tres primeres són paquets d'ones gaussians i la última es una funció triangular.*

- **Evolució dels evect.** Definint el vector a evolucionar com a un dels propis (evect), es comprova com **no** hi ha evolució. Indici de que hem computat **bé** la evolució temporal.

- **Dimensions.** Un dels primers obstàcles apareix al fer evolucionar la funció d'ona. Aquesta en funció del potencial, el valor esperat de la seva energia i les mides de la caixa, arriva a sentir la influència de les parets (il·lustrat a la figura 3). Es vol evitar axó, ja que no formen part del problema i *no haurien de ser allà*, només es posen per poder solucionar discretitzant.

  Per evitar això, s'ha de conseguir que l'estructura no arrivi als extrems. Un cop definit (tria *arbitraria*) el potencial i la funció d'ona incial (amb la corresponent $\langle E \rangle$) es pot estudiar la zona on es mantindrà la funció d'ona mirant els punts de retorn clàssics. I d'aquesta manera podriem definir les posicions de les parets per conseguir minimitzar la seva influència. Per altra banda, això també es pot veure considerant unes parets fixades (a llocs de l'ordre de magnitud de les x) i limitant en aquest cas els valors de $\langle E \rangle$ i el potencial, fent que els punts de retorn quedin centrats.

  Com ens interessarà poder canviar els potencials i les funcions d'ona inicials, a més de no haver d'estar canviant el tamany de la caixa a cada nova ona i potencial, **fixem les posicions de les parets: a i b**.



(a) Frame #4 **(b)** Frame #6 **(c)** Frame #8 **(d)** Frame #10

Figura 3: Influència de la paret quan l'estructura de la funció d'ona s'apropa als extrems (etiquetes omeses per a il·lustrar, són les mateixes que a la figura 2).

$$\boxed{a = -10\text{Å} \;;\;\; b = +10\text{Å}}$$

Ara cal trobar la N ha utilitzar. El criteri aquí serà la calitat d'imatge. [1]. Com hem d'utilitzar funcions d'ones típiques que podriem treure de l'evolució mateix, primer de fet definim el potencial i valors de $\langle E \rangle$ permesos per la (no)influència de la paret. Un cop poguem evolucionar sense tocar la paret, canviarem la N.
Dependencia de psi amb sigma i p0
calcul del punt de retorn
limitacions de sigma p0 i el potencial

[1]Passa una cosa molt rara quan vas plotejant algun evect amb cada cop mes N (sense linies, només punts '.' o pixels ','), surten coses semblants a lo de Lissajous.