

Tarea 1 FI4005-1 - Primavera 2022 (Parte MC)

Profesor: Mario Riquelme

Entrega: 28 de noviembre

Problema 1:

Usando el método de shooting mostrado en clases, encuentre:

- a) Los auto-valores de energía para los estados $1s$, $2s$ y $3s$ del hidrógeno. Utilice el método de leap-frog para integrar las funciones de onda desde $r = 30$ radios de Bohr (a_0) hacia adentro, usando $N=1000$ pasitos. Use el método de bisección para encontrar los auto-valores de energía, normalizados por 13.6 eV, con una tolerancia de $10^{-4} \times 13.6$ eV.
- b) Considerando su resultado en a), grafique las correspondientes funciones $U(r) = R(r)r$ para los tres auto-estados de energía encontrados, usando a_0 como unidad de distancia. Use una normalización arbitraria para $U(r)$, pero grafique los tres casos en una misma figura.

Problema 2:

Repita el problema 1, usando los mismos parámetros (resolución espacial y tolerancia en el método de bisección) pero integrando “desde adentro hacia afuera”, partiendo del origen. Esta vez los auto-estados de energía corresponderán a los casos en que la función de onda se hace cero en $r = 30a_0$. ¿Pudo encontrar las funciones $U(r)$ correspondientes a los auto-estados? Grafique lo que haya podido encontrar y comente. Compare los auto-valores de energía encontrados, con los que obtuvo en el problema 1. ¿Son más o menos cercanos a los teóricos? Explique por qué.

Problema 3:

Repita el problema 2, pero usando el método de Numerov, y esta vez sólo busque los auto-valores de energía, no es necesario que encuentre las funciones $U(r)$. (En este caso tendrá que realizar su primer paso usando leap-frog, para evitar tener que evaluar el potencial efectivo en el origen). Entregue los auto-valores encontrados, y comente si el método de Numerov ayudó en este caso a refinarlos.

Entregue un informe escrito en Latex con sus respuestas, y los códigos de Python con los que las obtuvo.