

Pràctica 8: Autovalors i autovectors d'un pou finit 1D

Objectius: Eq. Schrödinger, Resolució de EDOs, Runge-Kutta, mètode del tir, Estats lligats

— Nom del programa **P8-18P.f**.

Resoldrem l'equació d'Schrödinger independent del temps per trobar els autovalors i autovectors d'un electró en un potencial de pou quadrat finit,

$$\frac{-\hbar^2}{2m_e} \partial_x^2 \phi(x) + V(x)\phi(x) = E\phi(x) \quad (0.15)$$

amb $V(x) = V_1(x)$. On $V_1(x) = -80$ eV si $|x| \leq 3\text{\AA}$ i $V_1(x) = 0$ si $|x| > 3\text{\AA}$, on $\hbar^2/(2m_e) = 3.80995$ eV \AA^2 . Treballa en unitats: \AA , eV, per a les distàncies i energies, respectivament. Utilitza el mètode de Runge-Kutta4 de la prepràctica.

- 1) Considera $E_1 = -80.3$ eV, $E_2 = -79.5$ eV, $E_3 = -75.1$ eV i $E_4 = -75.5$ eV. Obtingues les solucions corresponents per a l'equació diferencial amb la condició inicial, $\phi(x_0) = 0\text{\AA}^{-1/2}$ i $\phi'(x_0) = 10^{-5}\text{\AA}^{-3/2}$.

Per integrar l'equació d'Schrödinger fes servir una caixa de longitud $L = 7\text{\AA}$, començant amb $x_0 = -L/2$. Integra l'equació amb 500 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 $x \in [-L/2 : L/4]$ (sense normalitzar), **P8-18P-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' $E_5 = -70$ eV i $E_6 = -71$ eV pel tercer. Atura el càlcul quan es satisfaci la condició de contorn, $|\phi(x_0 + L)| < 10^{-8}\text{\AA}^{-1/2}$. Fes una figura mostrant la convergència del mètode, mostrant el valor de l'energia a cada iteració pels 3 autovalors, **P8-18P-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:

$$\int_{-L/2}^{L/2} |\phi(x)|^2 dx = 1, \text{ P8-18P-fig3.png.}$$

- 3) Considera l'efecte d'una pertorbació, de tal manera que el potencial sigui, $V(x) = V_1(x) + \beta x^2$.

a) Estudia com canvia l'autovector d'energia més baixa (estat fonamental) amb $\beta = 0, 1, 5$ eV \AA^{-2} . Fes una figura comparant l'estat fonamental normalitzat calculat amb els diferents valors de β , **P8-18P-fig4.png**.

b) Escribeu en un arxiu **P8-18P-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: **P8-18P.f**, **P8-18P-fig1.png**, **P8-18P-fig2.png**, **P8-18P-fig3.png**, **P8-18P-fig4.png**, **P8-18P-res1.dat**, scripts gnuplot