

Pre-Pràctica 8: Runge Kutta

Objectius: [Resolució de EDOs, Runge-Kutta, mètode del tir, Estats lligats](#)

— Nom del programa **P8-22-23.f90**.

Resoldrem l'equació d'Schrödinger independent del temps per trobar els autovalors i autovectors d'una partícula en una caixa 1D de mida L .

$$-\frac{1}{2}\partial_x^2\phi(x) + V(x)\phi(x) = E\phi(x) \quad \text{amb } x \in [0, 1] \quad \text{i} \quad \phi(0) = \phi(1) = 0$$

on les x estan en unitats d' L i les energies en unitats de $\hbar^2/(mL^2)$. El potencial es constant: $V(x) = -0.5$.

- 1) Escriu una subrutina general **RungeKutta4(t,dt,nequs,yyin,yyout)** que calculi un pas del mètode de Runge Kutta 4, per a un sistema de **nequs** equacions de primer ordre acoblades. L'estructura inicial de la subrutina ha de ser,

```
SUBROUTINE RUNGEKUTTA4(T,DT,NEQUS,YYIN,YYOUT)
  INTEGER NEQUS
  DOUBLEPRECISION YYIN(NEQUS),YYOUT(NEQUS)
```

- 2) Escriu una subrutina **derivades(nequ,t,yin,dyout)**, que donat t , i un vector **yin**, torna el valor de $dyin/dt$ dins del vector **dyout**.

```
SUBROUTINE DERIVADES(NEQU,T,YIN,DYOUT)
  DOUBLE PRECISION T,YIN(NEQU),DYOUT(NEQU)
```

Escriu la subrutina especialitzada per a l'equació a resoldre.

- 3) Programa un mètode de tir per trobar l'estat fonamental i primer estat excitat de la partícula dins de la caixa. L'algorisme consta de quatre passos, els dos primers són per a començar el mètode de la secant per buscar $\phi_E(1) = 0$, on $\phi_E(x)$ és la solució de l'equació per energia E :

- a) Considera dos valors de l'energia E_1 i E_2 (diferents però propers).
- b) Integra l'equació d'Schrödinger començant per $\phi(0) = 0$ i $\phi'(0) = 0.25$ fins al punt $x = 1$, obtenint $\phi_{E_1}(1)$ i $\phi_{E_2}(1)$, respectivament.
- c) Considera la nova energia,

$$E_3 = \frac{E_1\phi_{E_2}(1) - E_2\phi_{E_1}(1)}{\phi_{E_2}(1) - \phi_{E_1}(1)} \quad (0.22)$$

i torna a resoldre l'equació fins a $x = 1$.

- d) Si $|\phi_{E_3}(1)| < 10^{-6}$ considerem que hem convergit, si no, tornem a c) amb $E_2 \rightarrow E_1$ i $E_3 \rightarrow E_2$.

- 4) Obtingues els quatre primers autovalors i autovectors. Normalitza els autovectors, $\int_0^1 |\phi(x)|^2 dx = 1$. Escriu en un arxiu **P8-22-23-res.dat** els valors d' E per a cada pas de la secant pels tres autovalors. Genera una figura **P8-22-23-fig.png** amb els cinc autovectors normalitzats comparant-los amb la solució exacta. Compara els resultats obtinguts amb 50 i 800 passos per integrar l'equació.

Entregable: [P8-22-23.f90](#), [P8-22-23-res.dat](#), [P8-22-23-fig.png](#)