Proyecto 1

Consideramos la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\,\varphi(\vec{r}) + V(r)\,\varphi(\vec{r}) = E\,\varphi(\vec{r})$$

Para el potencial coulombiano $V(r) = -\frac{\alpha\hbar c}{r}$

$$-\nabla_x^2\,\varphi(\vec{x}) + V(x)\,\varphi(\vec{x}) \;=\; \epsilon\,\varphi(\vec{x})$$

con $\vec{x} = \vec{r}/a_0$, $\epsilon = \frac{E}{\frac{1}{2}mc^2\alpha^2}$, $a_0 = \frac{\hbar}{\alpha mc}$ y $V(x) = -\frac{2}{x}$. Desarrollamos la función de onda en las funciones $\phi_i(\vec{x};\alpha_i,l)$

$$\varphi(\vec{x}) \;=\; \sum_{i=1}^{N} c_i\phi_i(\vec{x};\alpha_i,l) \tag{1}$$

donde l representa el momento angular y las diferentes funciones corresponden a

$$\phi_i(\vec{x};\alpha_i,l) \;=\; \left(\frac{(2\alpha_i)^3}{(2l+2)!}\right)^{1/2} (2\alpha_i x)^l e^{-\alpha_i x}\, Y_{lm}(\hat{x})$$

con los N diferentes valores α_i ($i = 1,\ldots,N$). De esta manera podemos transformar la ecuación diferencial en un sistema de ecuaciones lineales

$$\sum_{i=1}^{N}\left(T_{ji}^l + V_{ji}^l\right)c_i = \epsilon\sum_{i=1}^{N} N_{ji}^l c_i$$

siendo

$$\begin{aligned}
N_{ji}^l &= \int \phi_j^*(\vec{x};\alpha_j,l)\phi_i(\vec{x};\alpha_i,l)\,d^3x = \frac{(4\alpha_j\alpha_i)^{l+3/2}}{(\alpha_i+\alpha_j)^{2l+3}} \\
T_{ji}^l &= -\int \phi_j^*(\vec{x};\alpha_j,l)\nabla^2\phi_i(\vec{x};\alpha_i,l)\,d^3x = N_{ji}^l\alpha_j\alpha_i \\
V_{ji}^l &= \int \phi_j^*(\vec{x};\alpha_j,l)V(x)\phi_i(\vec{x};\alpha_i,l)\,d^3x
\end{aligned}$$

Los elementos de matriz del potencial podemos obtenerlos en función de los elementos de matriz correspondientes al operador x elevado a una potencia β, $O(x) = x^\beta$ ($\beta = -1$ para el potencial coulombiano)

$$O_{ji}^l \;\equiv\; \int \phi_j^*(\vec{x};\alpha_j,l)O(x)\phi_i(\vec{x};\alpha_i,l)\,d^3x = N_{ji}^l\frac{1}{(\alpha_j+\alpha_i)^\beta}\frac{\Gamma[3+2l+\beta]}{\Gamma[3+2l]}$$

donde $\Gamma(x)$ es la función gamma que verifica $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$. Notar que para β entero el cociente de funciones gamma es muy sencillo, en particular,

$$\frac{\Gamma[3+2l-1]}{\Gamma[3+2l]} = \frac{1}{3+2l-1}$$

Obtenemos así un problema de autovalores generalizado

$$A^l c \;=\; \epsilon N^l c$$

donde N^l es una matriz definida positiva.

1. Buscar las subrutinas adecuadas de la librería LAPACK para la solución del problema de autovalores y autovectores.

2. Calcular las matrices T^l_{ji}, V^l_{ji} (potencial coulombiano) y N^l_{ji}. Los valores de α_i y N se darán al principio del programa y se elegirán de forma adecuada.

3. Utilizando la rutinas de LAPACK resolver el problema de autovalores y autovectores. Seleccionar los tres autovalores de mínima energía. Todos los cálculos se realizarán para estos tres estados para los valores de momento angular $l = 0, 1, 2$.

4. Normalizar cada uno de los autovectores ($c^T N^l c = 1$) y determinar los valores esperados de r y r^2.

5. Generar un archivo con la función de onda radial del estado fundamental de $l = 1$ $\varphi(x) = \sum_{i=1}^{N} c_i \tilde{\phi}_i(x; \alpha_i, 1)$ siendo $\tilde{\phi}_i$ la función ϕ_i sin el harmónico esférico. En dicho archivo se dará en dos columnas las parejas de valores x y $\varphi(x)$ haciendo variar x entre 0 y un valor máximo x_{max} que se elegirá de forma adecuada.

A parte de la corrección y precisión de los resultados se valorará la claridad en la programación.