

Fisica Computacional 2022

Guía de TP N° 4: Problemas de autovalores y autovectores.

octubre , 2022

1. Explicar el método de Jacobi para diagonalizar una matriz simétrica. Indicar el numero de operaciones como escala en función del numero de filas o columnas de la matriz.
2. Describir en que consiste el metodo de Householder, para que matrices es utilizable y cual es su performance.
3. Consideremos un problema de un electron en un potencial

$$V(x) = 4V_0 \left(4 \left(\frac{x}{D} \right)^4 - 2 \left(\frac{x}{D} \right)^2 \right) \quad (1)$$

Este potencial tiene minimos en $x_{min} = \pm D/2$, con una energía V_0 en estos puntos. Cuando aumentamos el valor de R , tenemos que los minimos se van separando. Se puede considerar como un proceso de disociacion molecular. Cada átomo esta centrado en los mínimos del potencial, de manera que D es la distancia interatomica.

Para resolver este problema es conveniente usar una base de estado del oscilador armonico simple con estados centrados en el origen de coordenadas. Asumir la frecuencia del oscilado asumiendo ω_0 , y que la masa de la partícula es m . Usando distancias en unidades de la longitud típica del oscilador $D_0 = \sqrt{\hbar/m\omega_0}$, y la energía expresada en unidades de $\varepsilon_0 = \hbar\omega_0$

- (a) Encontrar los elementos de matriz de este hamiltoniano en la base de oscilador armonico truncada. Es decir usando los primeros N_b estados
- (b) Diagonalizar y encontrar las energías del sistema para distintos N_b , encontrar el numero minimo N_b de estados del oscilador, necesarios para tener precisión relativa del 0.1% en la energía del estado fundamental de este problema, calculando el error como :

$$\varepsilon = \frac{|E_0(N_b) - E_0(N_b - 1)|}{E_0(N_b)} \quad (2)$$

Hacer una grafica de ε en función de N_b para distintos β .

- (c) Analizar el punto (b) para distintos valores de D . Graficar para el N_b optimo en cada caso la energia del estado fundamental, el primer y el segundo excitado en función de D .
- (d) Dibujar el estado fundamental y el primer excitado para D pequeño y D grande, mostrando que el estado fundamental es un estado con probabilidad 1/2 en cada pozo.
- (e) Para D grande, se aplica un campo electrico pequeño, demostrar que el estado se encuentra localizado en un minimo o en el otro, dependiendo del signo del campo electrico, y de la relacion entre D y el valor del potencial electrico $V(x) = V_E(x/D)$.