

Práctica 8: Autoestados de la ecuación de Schrödinger usando Runge Kutta

Bruno Juliá-Díaz (brunojulia@ub.edu)

Dpt. Física Quàntica i Astrofísica

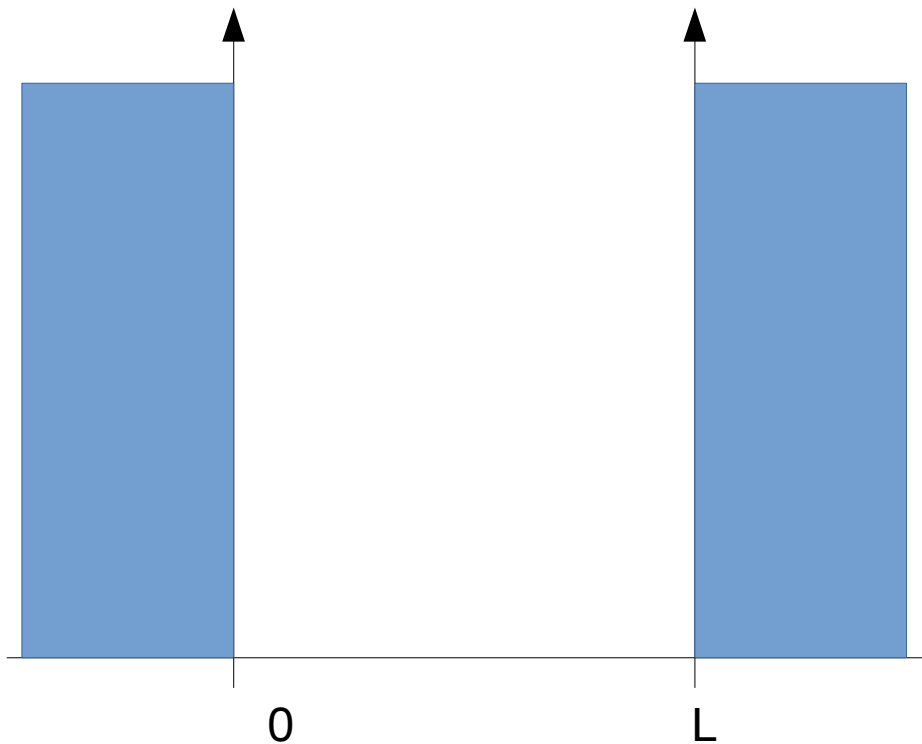
Facultat de Física

Universitat de Barcelona

Curso 2016/2017

Partícula en una caja (1)

Es uno de los problemas más sencillos de mecánica cuántica.



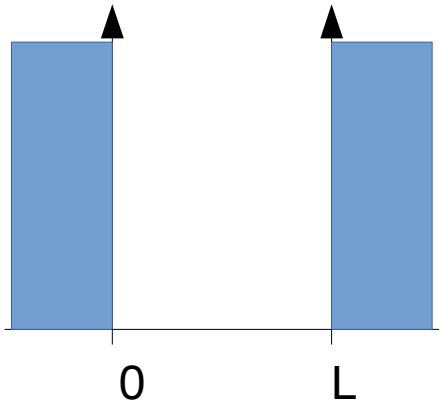
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + V\phi(x) = E\phi(x)$$

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 \leq x \leq L \\ \infty & \text{si } x < 0 \text{ o } x > L \end{cases}$$

Para este potencial queda:

$$\frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \phi(x) = 0 \quad \phi(0) = \phi(L) = 0$$

Partícula en una caja (4)



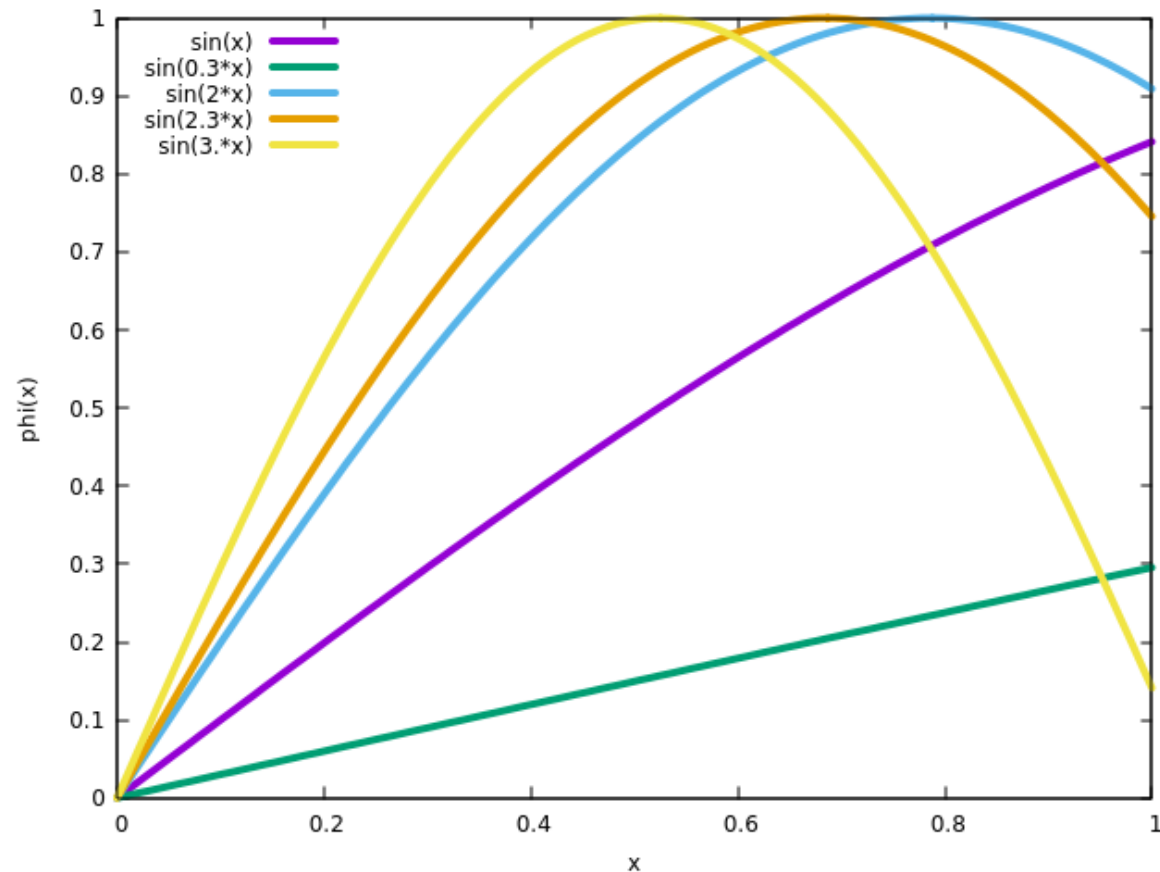
Con una sola condición de contorno aún tenemos soluciones para cualquier energía. Al imponer la segunda condición de contorno obtenemos la **cuantización de la energía**.

Solo algunos valores de la energía harán que:

$$\phi(1) = 0$$

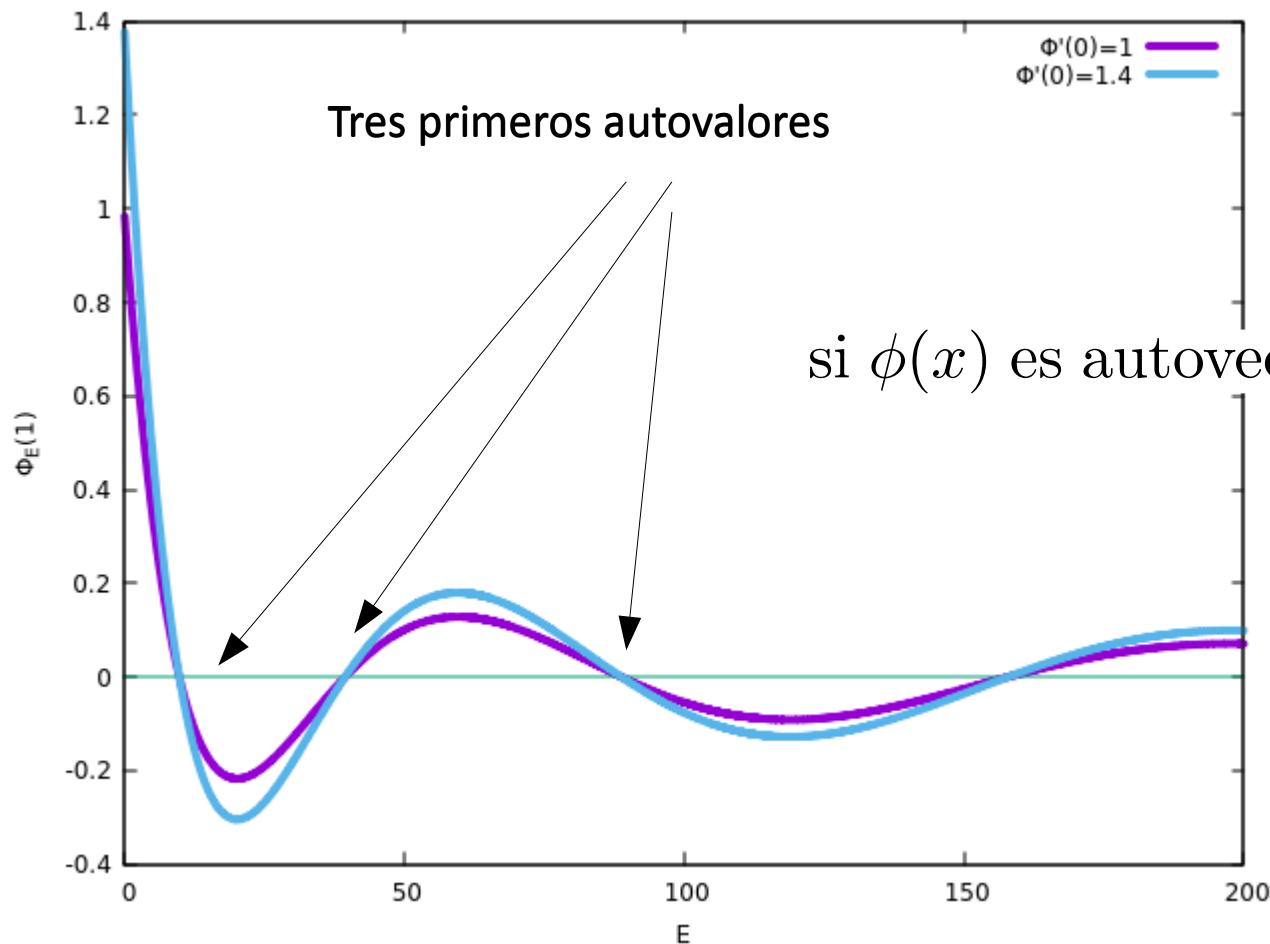
$$\frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + E\phi(x) = 0$$

$$\phi(0) = \phi(1) = 0$$



Vuelta a la prepráctica 8

- 4) Obté els tres primers autovalors i autovectors. Normalitza els autovectors, $\int_0^1 |\phi(x)|^2 dx = 1$. Escriu en un fitxer **P8-2016-res.dat** els valors d' E per a cada pas del Regula Falsi pels tres autovalors. Genera una figura **P8-2016-fig.png** amb els tres autovectors normalitzats comparant-los amb la solució exacta. Compara els resultats obtinguts amb 50 i 500 passos per a integrar l'equació.



Dependiendo del valor de la derivada en el origen obtenemos el autovector multiplicado por un número.

Recordemos:

si $\phi(x)$ es autovector $\Rightarrow \lambda\phi(x)$ también lo es

Esto permite normalizarlos, de forma que tengamos,

$$\int_0^1 |\phi(x)|^2 dx = 1$$

Vuelta a la prepráctica 8

- 4) Obté els tres primers autovalors i autovectors. Normalitza els autovectors, $\int_0^1 |\phi(x)|^2 dx = 1$. Escriu en un fitxer **P8-2016-res.dat** els valors d' E per a cada pas del Regula Falsi pels tres autovalors. Genera una figura **P8-2016-fig.png** amb els tres autovectors normalitzats comparant-los amb la solució exacta. Compara els resultats obtinguts amb 50 i 500 passos per a integrar l'equació.

Para asegurar que todo funciona bien, comprobado con el resultado exacto:

$$E_n = (n\pi)^2 \frac{\hbar^2}{2mL^2} \quad , n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

En resumen

Adaptados para funciones tabuladas

La práctica requiere:

- 1) Métodos para buscar ceros de funciones (secante).
- 2) Métodos para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias (Runge Kutta).
- 3) Métodos para integrar el valor absoluto al cuadrado de la función de onda (Trapeacios, Simpson).

Y permite:

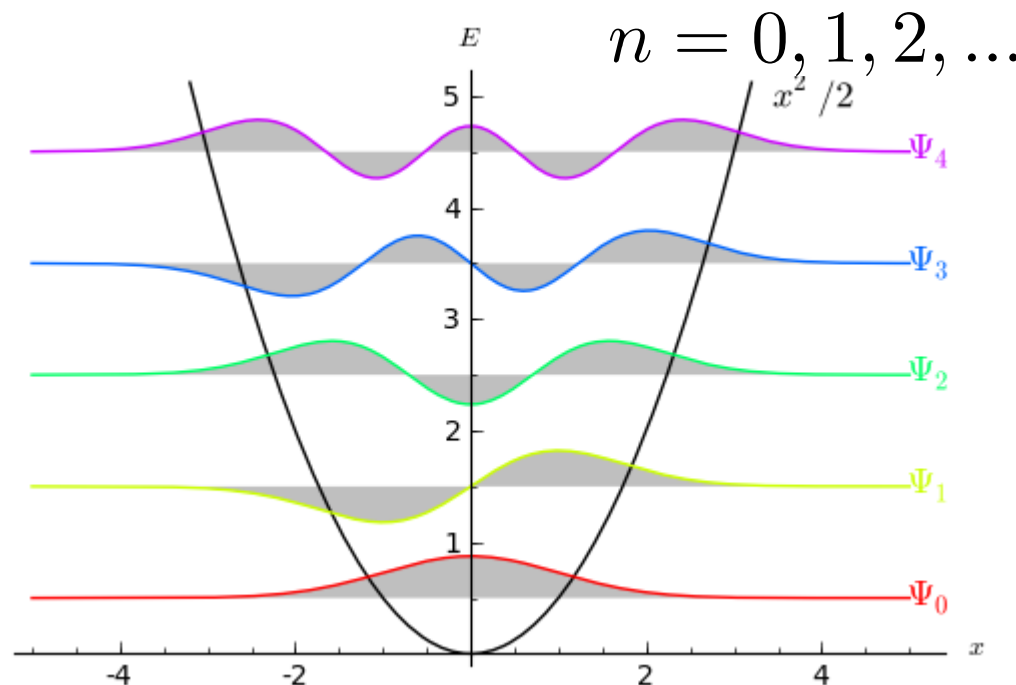
- A) Obtener autovalores y autovectores de la ecuación de Schrödinger 1D

Práctica del grupo B1

Resoldrem l'equació d'Schrödinger independent del temps per trobar els autovalors i autovectors d'un electró en un potencial d'oscillador 1D,

$$\frac{-\hbar^2}{2m_e} \partial_x^2 \phi(x) + V(x)\phi(x) = E\phi(x) \quad (0.27)$$

amb $V(x) = \frac{1}{2}m_e\omega^2 x^2$, on $\hbar^2/(2m_e) = 3.80995 \text{ eV } \text{\AA}^2$, $\hbar\omega = 2.76041 \text{ eV}$ i $m_e\omega^2 = 1 \text{ eV } \text{\AA}^{-2}$. Treballa en unitats: \AA , eV, per a les distàncies i energies, respectivament. Utilitza el mètode de Runge-Kutta4 de la prepràctica.



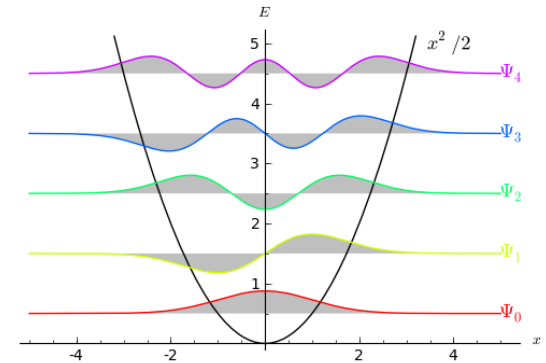
$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

Figura chemistry.stackexchange

Práctica del grupo B1

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$$

$$n = 0, 1, 2, \dots$$



- 1) Considera $E_1 = 0.43 \hbar \omega$, $E_2 = 0.48 \hbar \omega$, $E_3 = 1.4 \hbar \omega$ i $E_4 = 1.45 \hbar \omega$. Obté les solucions corresponents per a l'equació diferencial amb la condició inicial, $\phi(x_0) = 0 \text{Å}^{-1/2}$ i $\phi'(x_0) = 10^{-5} \text{Å}^{-3/2}$.

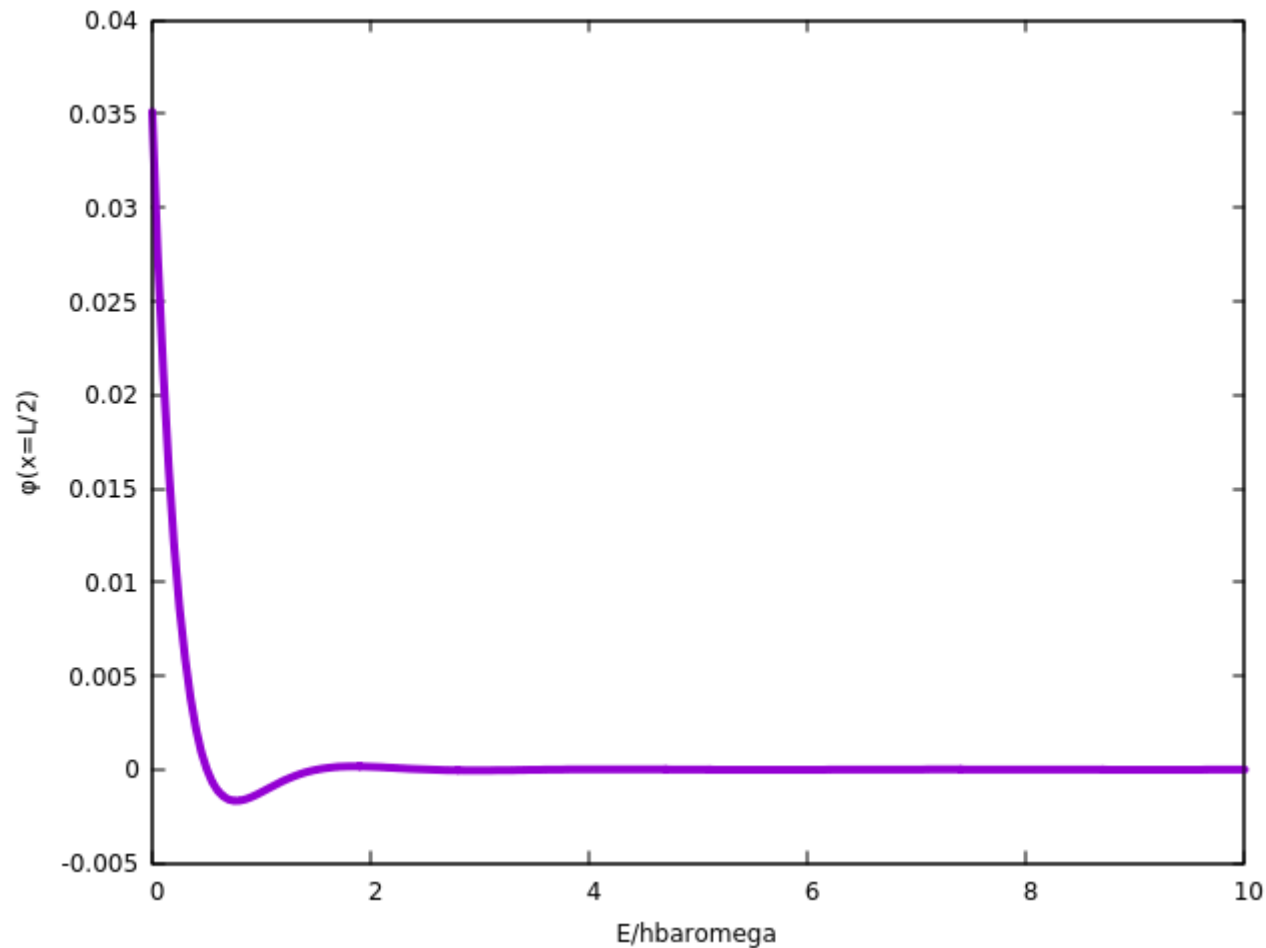
Per a integrar l'equació d'Schrödinger fes servir una caixa de longitud $L = 16 \text{Å}$, començant amb $x_0 = -L/2$. Integra l'equació amb 500 passos des de $x = -L/2$ fins a $x = L/2$.

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), P8-2016-b1-fig1.png.

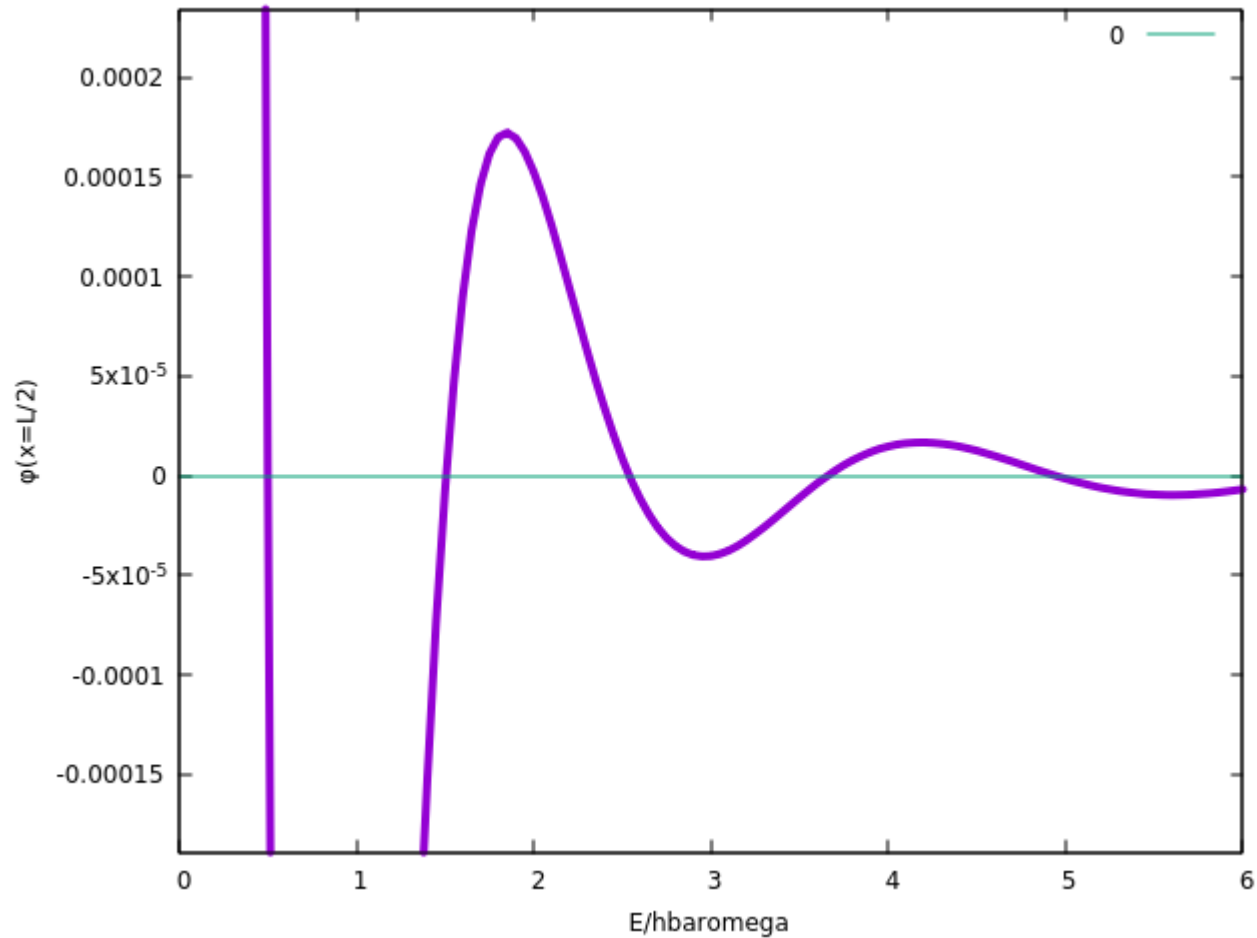
Qué problema estamos resolviendo exactamente?

Para el oscilador armónico todos los estados son ligados

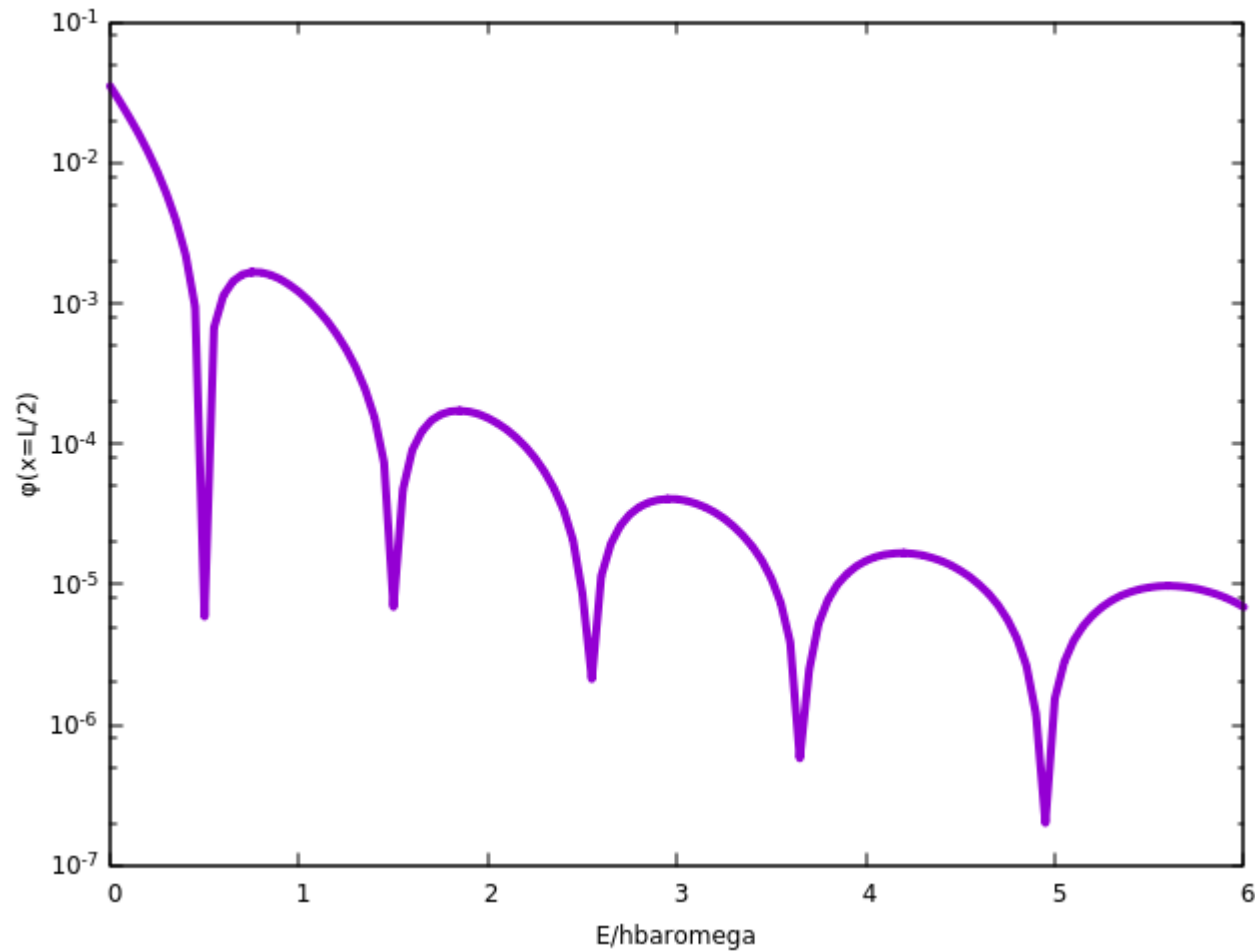
B1, función a la que le buscamos ceros



B1, función a la que le buscamos ceros



B1, función a la que le buscamos ceros



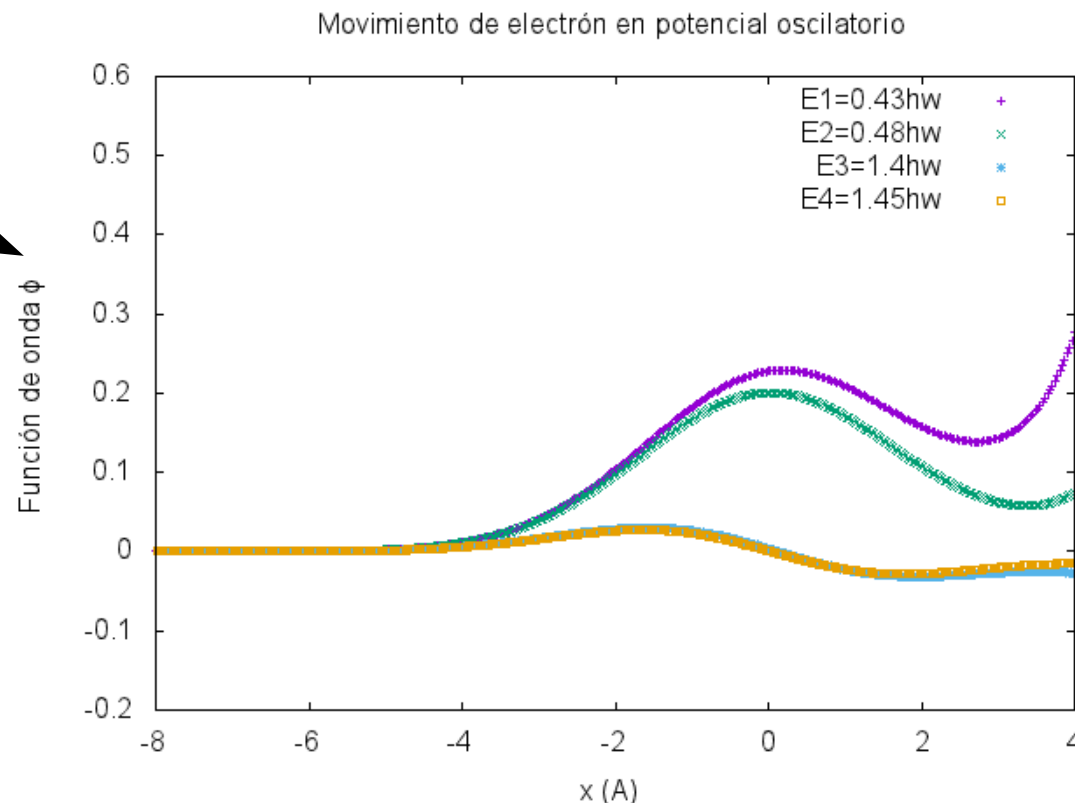
Soluciones con sólo un contorno

- 1) Considera $E_1 = 0.43 \hbar\omega$, $E_2 = 0.48 \hbar\omega$, $E_3 = 1.4 \hbar\omega$ i $E_4 = 1.45 \hbar\omega$. Obté les solucions corresponents per a l'equació diferencial amb la condició inicial, $\phi(x_0) = 0 \text{Å}^{-1/2}$ i $\phi'(x_0) = 10^{-5} \text{Å}^{-3/2}$.

Per a integrar l'equació d'Schrödinger fes servir una caixa de longitud $L = 16 \text{Å}$, 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), **P8-2016-b1-fig1.png**.

Unidades!



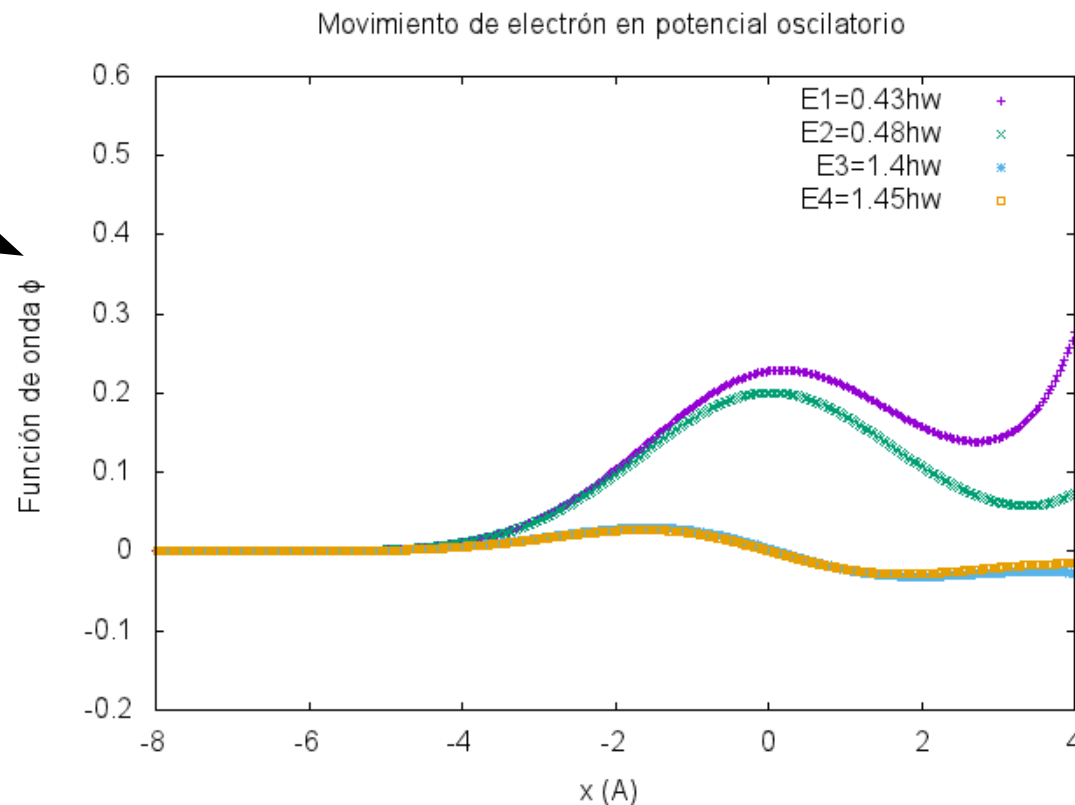
Soluciones con sólo un contorno

- 1) Considera $E_1 = 0.43 \hbar\omega$, $E_2 = 0.48 \hbar\omega$, $E_3 = 1.4 \hbar\omega$ i $E_4 = 1.45 \hbar\omega$. Obté les solucions corresponents per a l'equació diferencial amb la condició inicial, $\phi(x_0) = 0 \text{Å}^{-1/2}$ i $\phi'(x_0) = 10^{-5} \text{Å}^{-3/2}$.

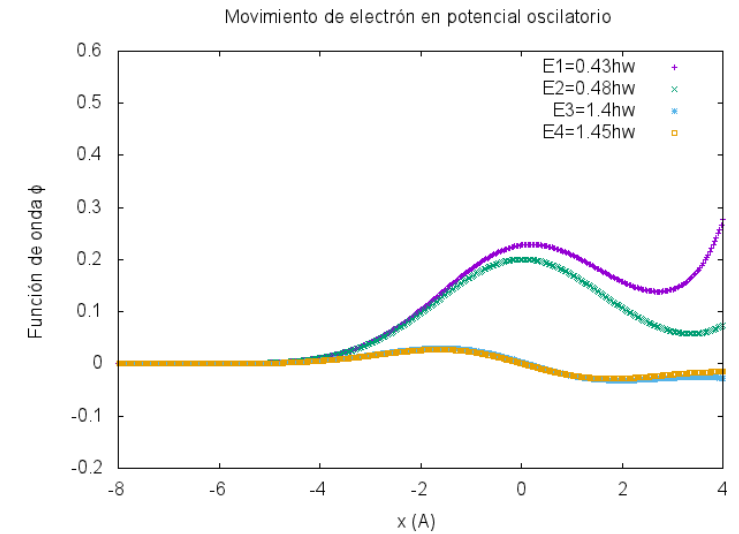
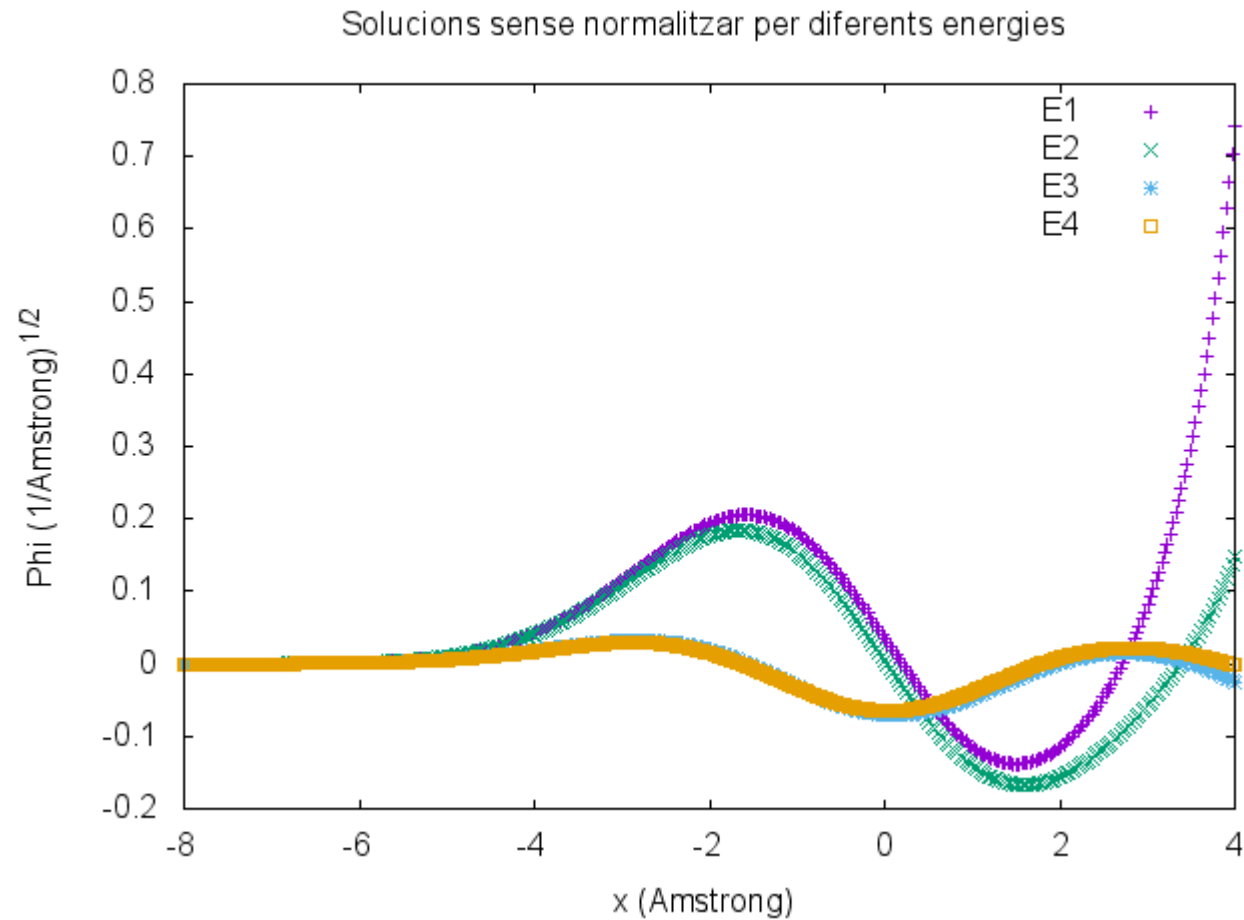
Per a integrar l'equació d'Schrödinger fes servir una caixa de longitud $L = 16 \text{Å}$, començant amb $x_0 = -L/2$. Integra l'equació amb 500 passos des de $x = -L/2$ fins a $x = L/2$.

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), **P8-2016-b1-fig1.png**.

Unidades!



Soluciones con sólo un contorno



¿Qué problema podría haber aquí?

Algoritmo

Condición de contorno

Valor arbitrario

- a) Considera dos valores de l'energía E_1 i E_2 (diferents però propers).
- b) Integra l'equació d'Schrödinger començant per $\phi(0) = 0$ i $\phi'(0) = 0.1$ fins al punt $x = 1$, obtenint $\phi_{E_1}(1)$ i $\phi_{E_2}(1)$, respectivament.
- c) Considera la nova energia,

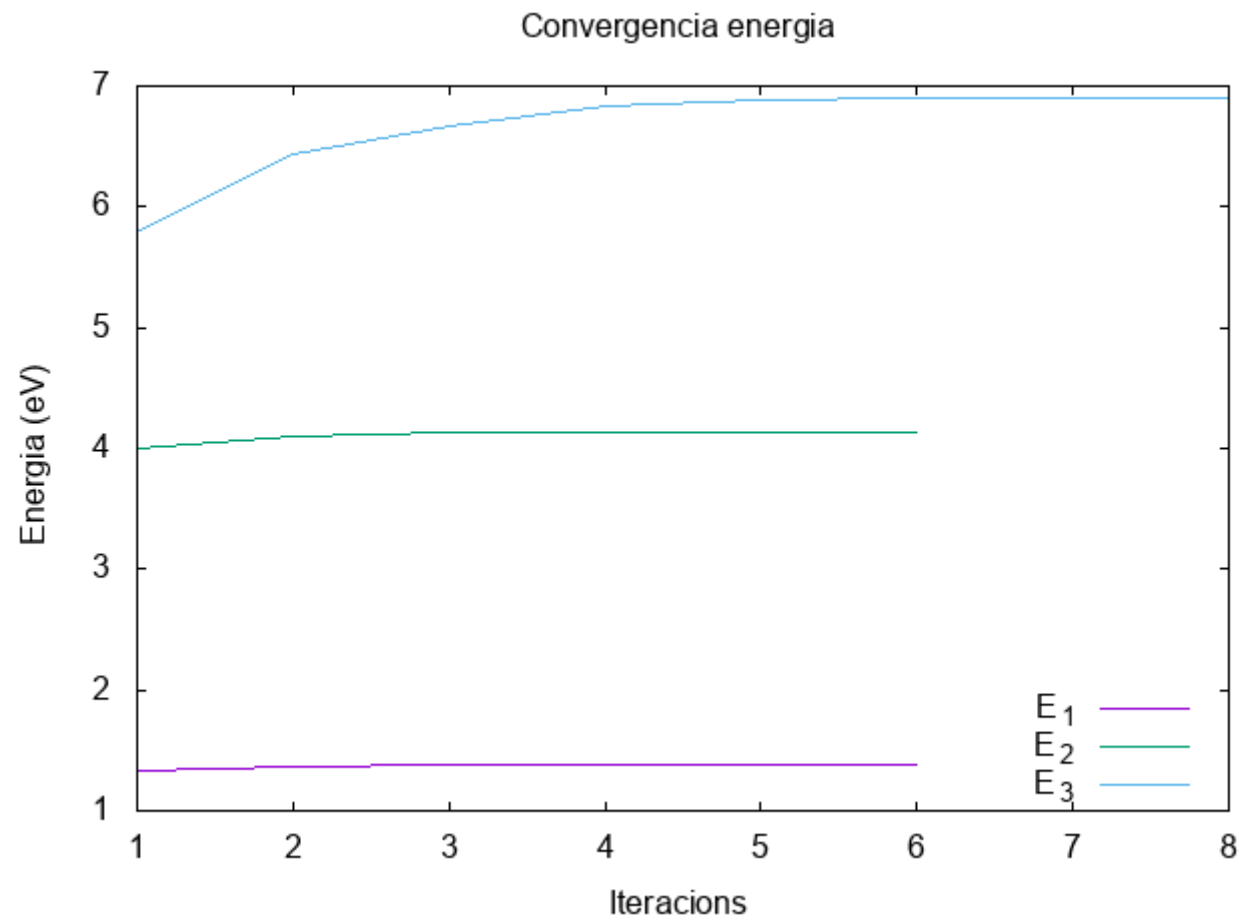
$$E_3 = \frac{E_1\phi_{E_2}(1) - E_2\phi_{E_1}(1)}{\phi_{E_2}(1) - \phi_{E_1}(1)} \quad (0.26)$$

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

- d) Si $|\phi_{E_3}(1)| < 10^{-8}$ considerem que hem convergit, si no, tornem a c) amb $E_2 \rightarrow E_1$ i $E_3 \rightarrow E_2$.

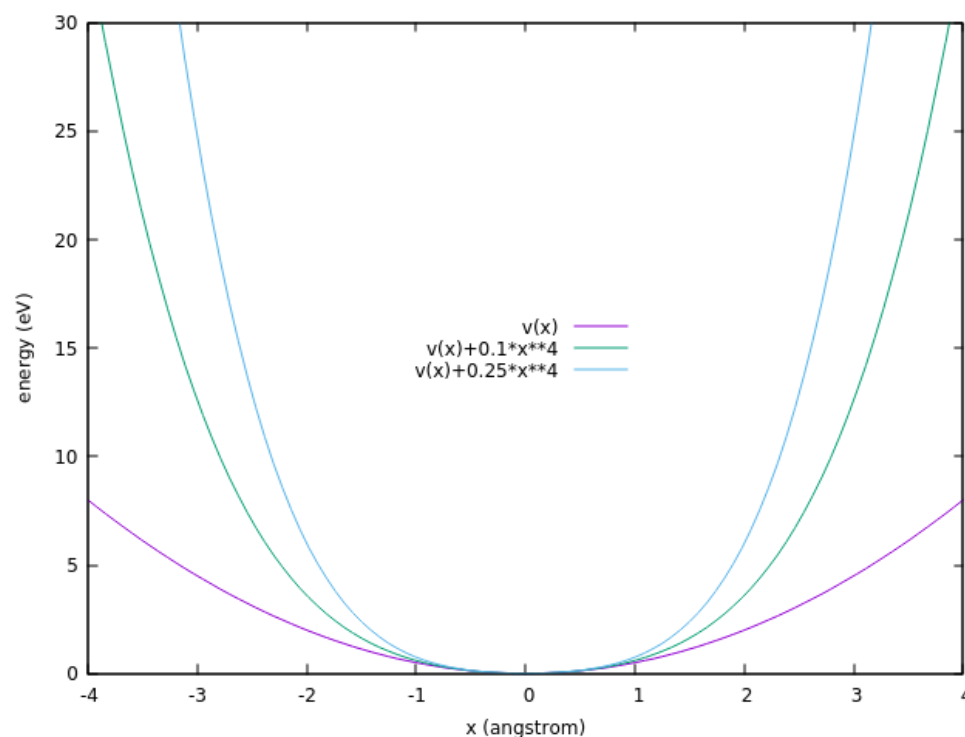
Utilizaremos Runge Kutta 4

Estudio de la convergencia



Anarmonicidad

- 3) Considera l'efecte d'una anarmonicitat d'ordre quart, de tal manera que el potencial confinant sigui, $V_2(x) = \frac{1}{2}m_e\omega^2x^2 + \beta x^4$. Fes servir en aquest cas $L = 10\text{\AA}$, $x_0 = -L/2$.
- a) Estudia com canvia l'autovector d'energia més baixa (estat fonamental) amb $\beta = 0, 0.1, 0.25 \text{ eV \AA}^{-4}$. Fes una figura comparant l'estat fonamental normalitzat calculat amb els diferents valors de β , **P8-2016-b1-fig4.png**.
- b) Escriu en un arxiu **P8-2016-b1-res1.dat** la probabilitat de trobar a l'electron en la regió $x \in [-\sigma : \sigma]$ pels tres valors de β , amb $\sigma = \sqrt{\hbar/(m_e\omega)} = 1.175\text{\AA}$.



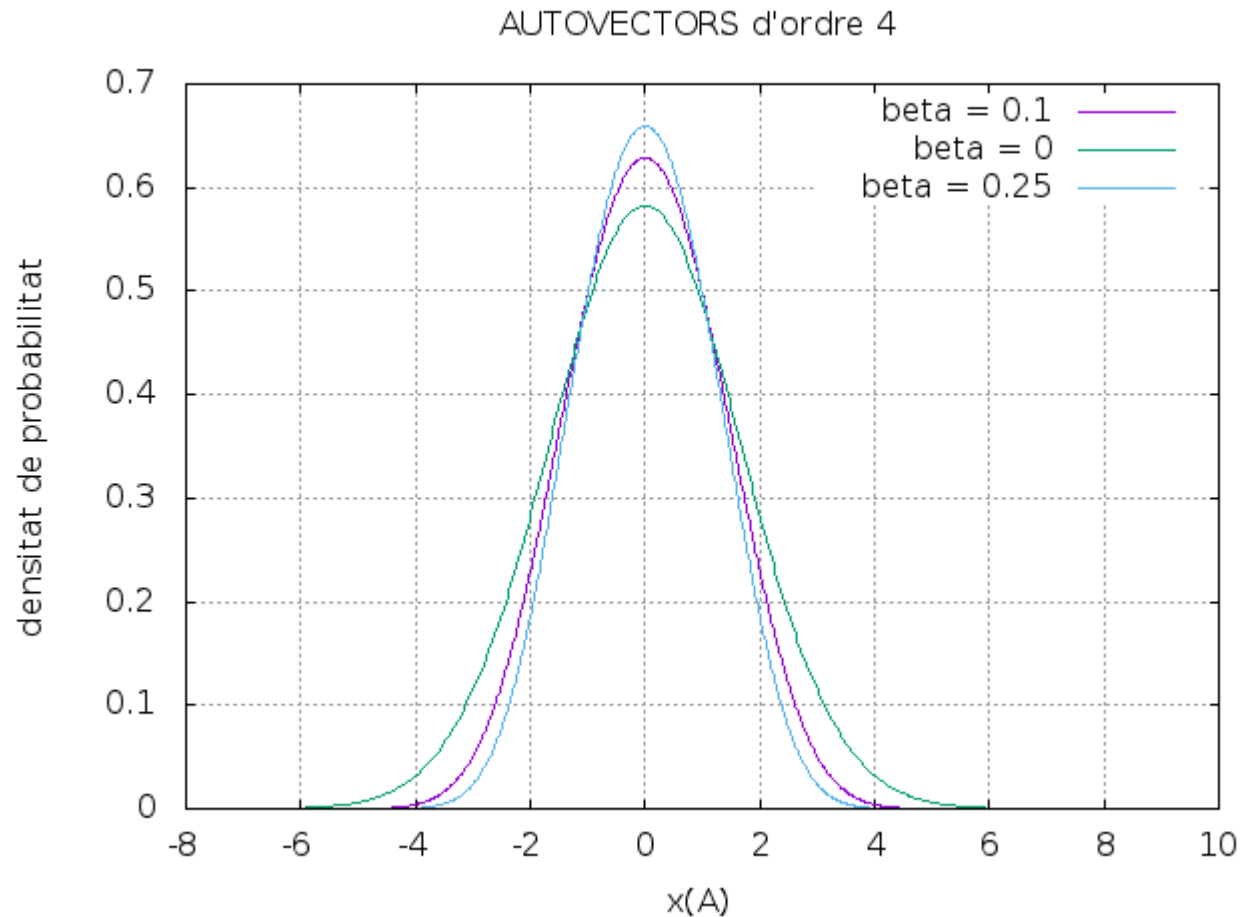
Anarmonicidad

- 3) Considera l'efecte d'una anarmonicitat d'ordre quart, de tal manera que el potential confinant sigui, $V_2(x) = \frac{1}{2}m_e\omega^2x^2 + \beta x^4$. Fes servir en aquest cas $L = 10\text{\AA}$, $x_0 = -L/2$.
- a) Estudia com canvia l'autovector d'energia més baixa (estat fonamental) amb $\beta = 0, 0.1, 0.25 \text{ eV \AA}^{-4}$. Fes una figura comparant l'estat fonamental normalitzat calculat amb els diferents valors de β , **P8-2016-b1-fig4.png**.
 - b) Escriu en un arxiu **P8-2016-b1-res1.dat** la probabilitat de trobar a l'electron en la regió $x \in [-\sigma : \sigma]$ pels tres valors de β , amb $\sigma = \sqrt{\hbar/(m_e\omega)} = 1.175\text{\AA}$.

Procedimiento:

- 1) Cambia el potencial
- 2) Escoge dos valores iniciales de la energia para calcular el estado de más baja energía del sistema con esa anarmonicidad
- 3) normaliza
- 4) dibuja

Anarmonicidad



Al añadir el potencial x^4 la partícula pasa a tener más probabilidad de estar situada cerca del origen.

Para cuantificarlo nos preguntamos cual es la probabilidad de encontrarla a menos de 1 sigma de la gaussiana original (autoestado sin anarmonicidad)

Práctica del grupo C2

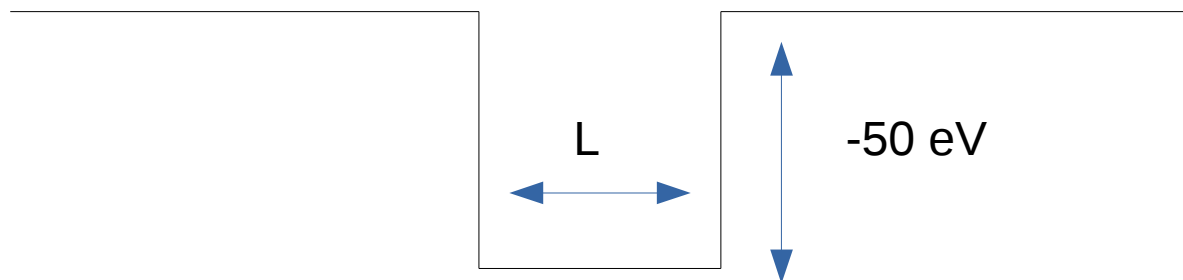
Resoldrem l'equació d'Schrödinger independent del temps per trobar els autovalors i autovectors d'un electró en un potencial de pou quadrat finit,

$$\frac{-\hbar^2}{2m_e} \partial_x^2 \phi(x) + V(x)\phi(x) = E\phi(x) \quad (0.28)$$

amb $V(x) = V_1(x)$. On $V_1(x) = -50$ eV si $|x| \leq 2\text{\AA}$ i $V_1(x) = 0$ si $|x| > 2\text{\AA}$, 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.

Los autovalores y autovectores no son analíticos en este caso.

No todos los autoestados son ligados...

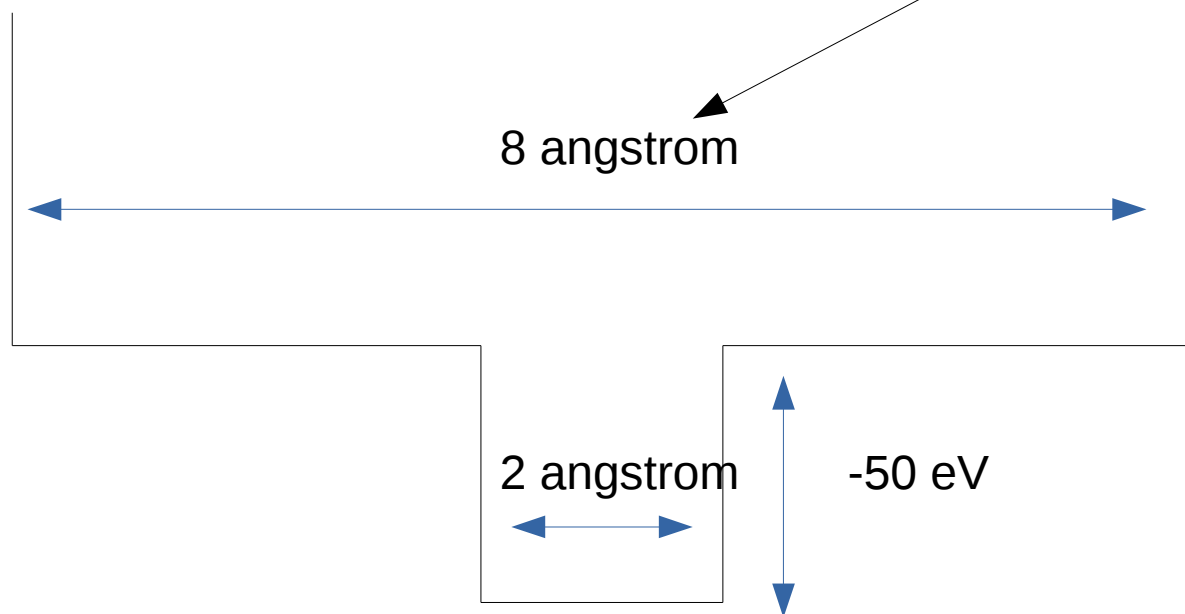


Práctica del grupo C2

- 1) Considera $E_1 = -50$ eV, $E_2 = -49.5$ eV, $E_3 = -45$ eV i $E_4 = -44$ eV. Obté les solucions corresponents per a l'equació diferencial amb la condició inicial, $\phi(x_0) = 0 \text{Å}^{-1/2}$ i $\phi'(x_0) = 10^{-5} \text{Å}^{-3/2}$.

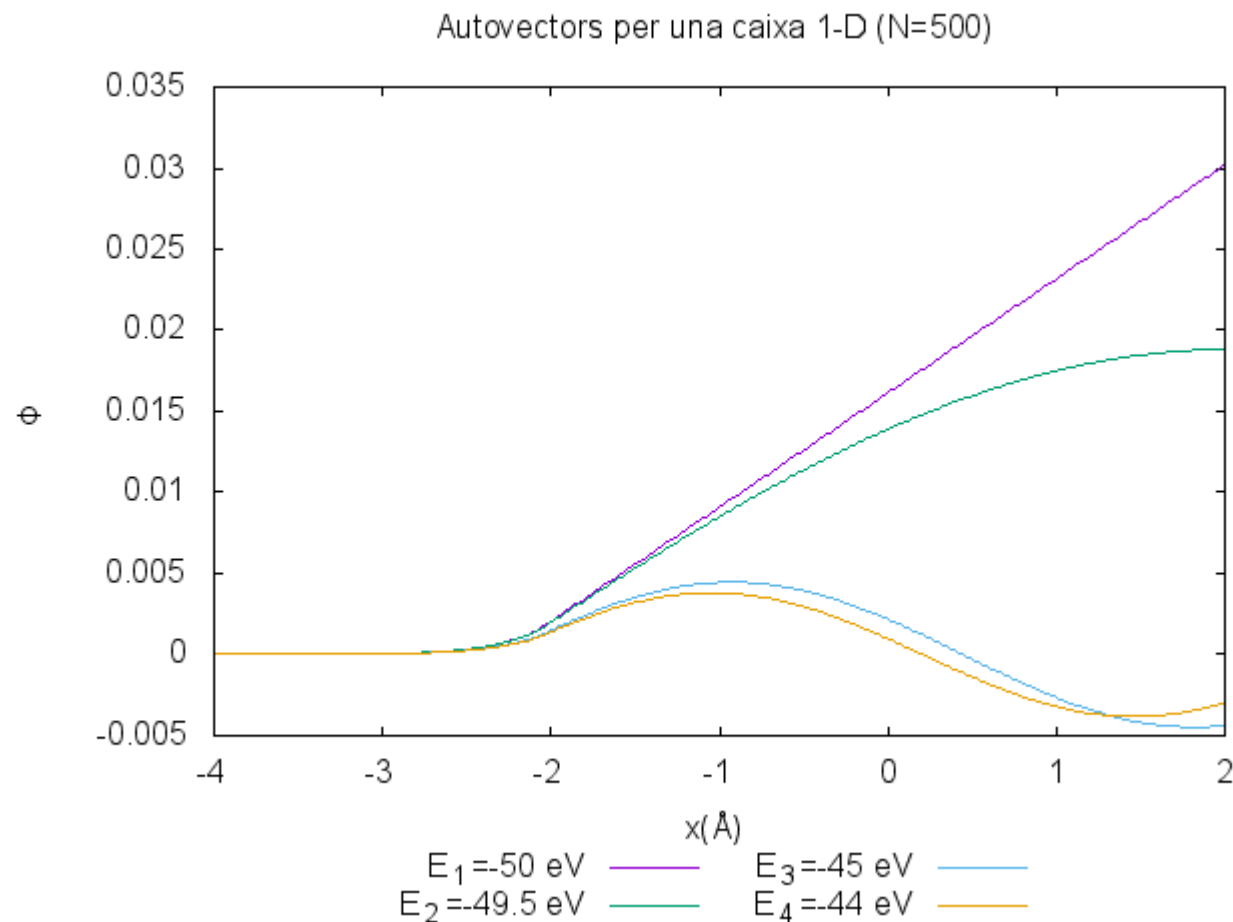
Per a integrar l'equació d'Schrödinger fes servir una caixa de longitud $L = 8 \text{Å}$, començant amb $x_0 = -L/2$. Integra l'equació amb 500 passos des de $x = -L/2$ fins a $x = L/2$.

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), P8-2016-c2-fig1.png.



Disparamos desde un lado

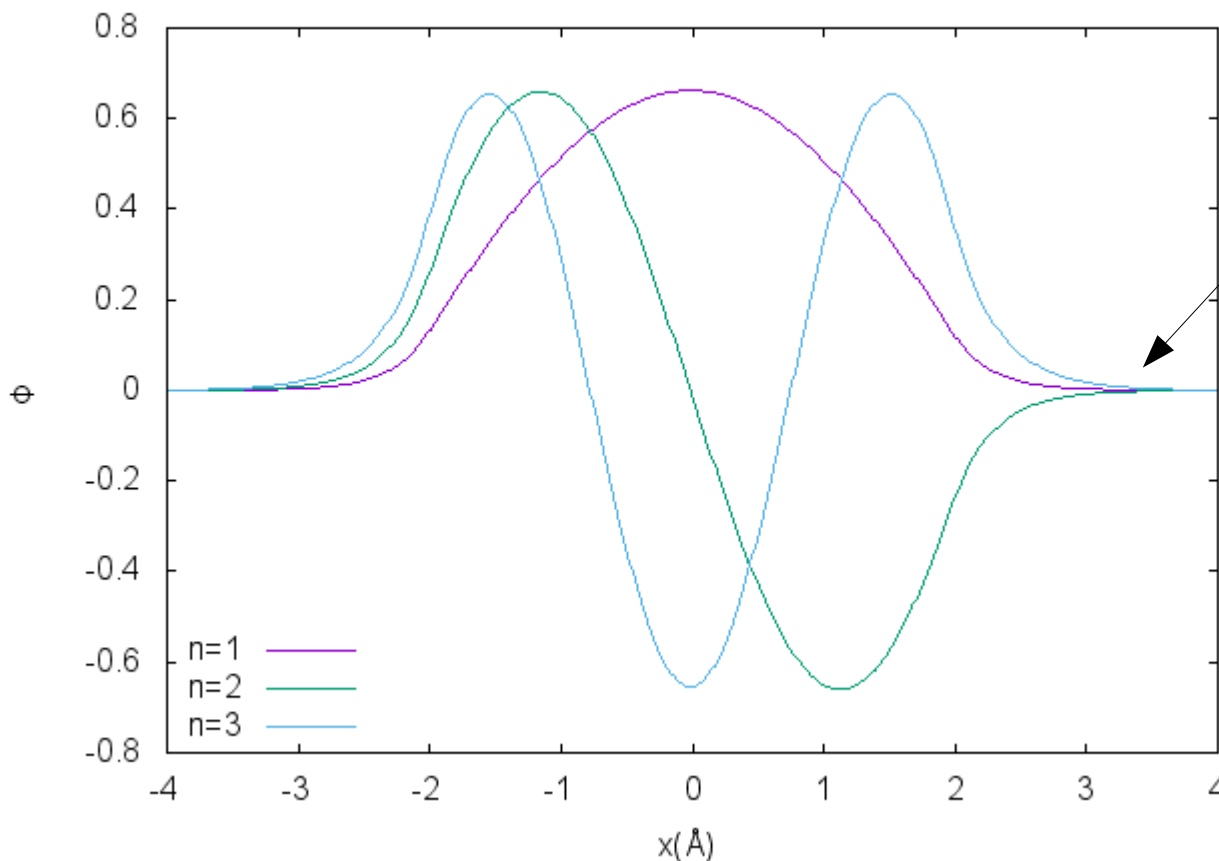
Disparamos desde el contorno de la izquierda.
Las soluciones no satisfacen el segundo contorno pero “más o menos”
muestran buen comportamiento.



Una vez que satisfacen ambos contornos

La cuantización de la energía (sólo algunos valores son posibles) aparece cuando imponemos ambos contornos.

Autovectores per una caixa 1-D (N=500)



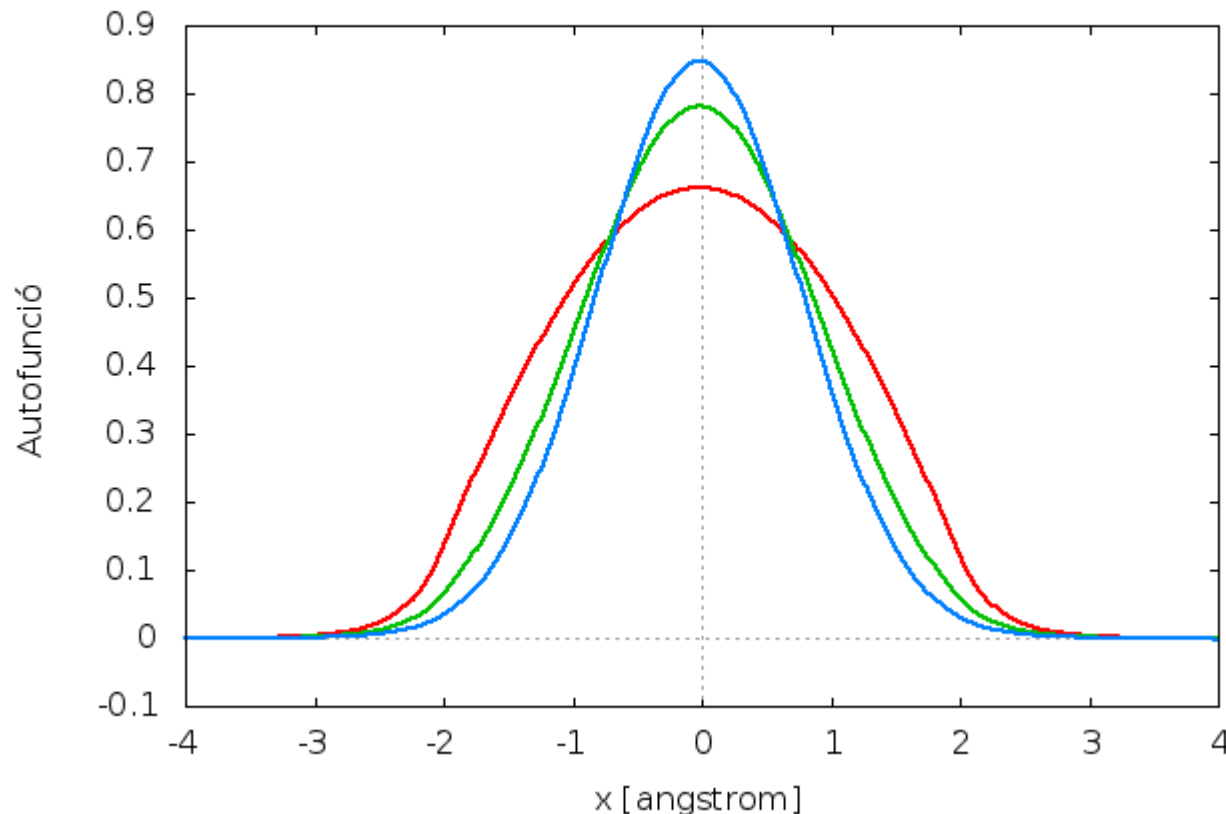
Añadimos un potencial armónico

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 $\beta = 0.5, 10 \text{ eV } \text{\AA}^{-2}$. Fes una figura comparant l'estat fonamental normalitzat calculat

beta = 0 psi1 — red — beta = 10psi1 — blue —
beta = 5psi1 — green —

: de trobar a l'electron en la



El estado fundamental es más picado en torno al origen de coordenadas y se va pareciendo cada vez más al estado fundamental del oscilador...

Práctica 9: Resolución de la ecuación de Poisson

Bruno Juliá-Díaz (brunojulia@ub.edu)

Dpt. Física Quàntica i Astrofísica

Facultat de Física

Universitat de Barcelona

Curso 2016/2017

Prepráctica, descripción de la placa

Objectius: Resolució de EDP, equacions el·líptiques, equació de Poisson, equació de la calor

— Nom del programa **P9-2016.f**.

- 1) Escriu un programa per resoldre l'equació de Poisson 2D en una geometria rectangular amb condicions de contorn de Dirichlet,

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \rho(x, y) = 0.$$

Considera per exemple el problema de calcular la distribució estacionaria de temperatures en un rectangle de $L_x = 40$ cm \times $L_y = 27.5$ cm amb les condicions de contorn, $T(0, y) = 25^\circ\text{C}$, $T(x, L_y) = 13.6^\circ\text{C}$, $T(L_x, y) = 35^\circ\text{C}$ i $T(x, 0) = 10^\circ\text{C}$. Utilitza $h = 0.5$ cm.

Prepráctica

1) Haz que el código haga todo en función de los números que se dan en la práctica.

Por ejemplo: si $Lx=40$ y $h=0.5$ entonces $nx=Lx/h$

2) Utiliza dos matrices para guardar las temperaturas

3) Asegúra que todo es razonable si cambias:

El valor de: $dx=dy=h$

Las dimensiones de la caja

En fortran (inicializamos)

```
implicit none
double precision dx, lx, ly
integer nx, ny, nkmax, igauss

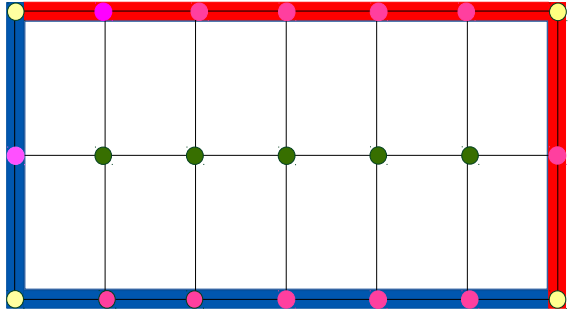
c paso en x e y
parameter (dx=0.05d0)

c longitud de la caja en cm
parameter (lx=30.d0)
parameter (ly=10.d0)

c numero de puntos en cada dirección
parameter (nx=int(lx/dx))
parameter (ny=int(ly/dx))

c numero de iteraciones de gauss seidel
parameter (nkmax=100000)

c matrices de temperaturas
double precision tnew(0:nx,0:ny), told(0:nx,0:ny), error, tol
integer i, j, k
```



■ T=0 grados
■ T=20 grados

Prepráctica, fuentes de calor

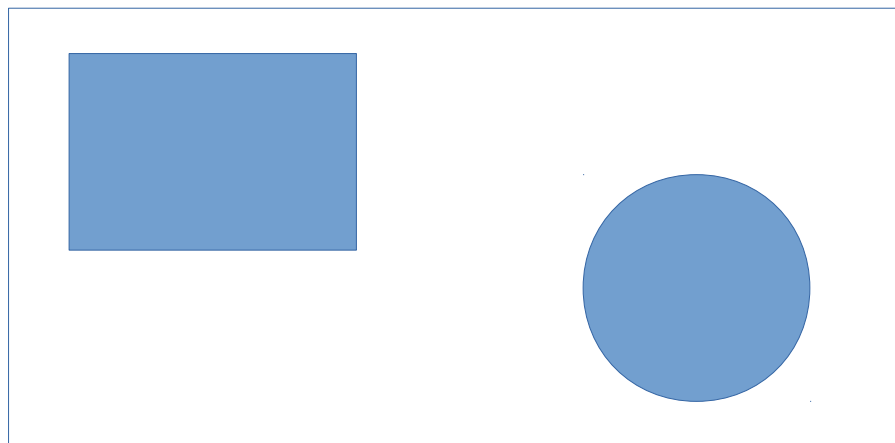
Com a font de calor considera dos fogons $\rho(x, y) = \rho_1(x, y) + \rho_2(x, y)$:

- El primer escalfa en una circumferència, centrada al punt $(7, 18)\text{cm}$, modelat com,

$$\rho_1(x, y) = \rho_{1,0} e^{-(r-3)^2/0.5^2} \quad \text{amb } r = \sqrt{(x-7)^2 + (y-18)^2}$$

i $\rho_{1,0} = 10 \text{ }^\circ\text{C}/\text{cm}^2$.

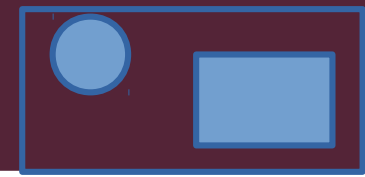
- El segon fogó escalfa en un rectangle de $8\text{cm} \times 12\text{cm}$ centrat a $(x, y) = (30, 7)\text{cm}$, dins del rectangle $\rho_2(x, y) = 3 \text{ }^\circ\text{C}/\text{cm}^2$, mentre que fora és $\rho_2(x, y) = 0 \text{ }^\circ\text{C}/\text{cm}^2$



Será más o menos así?

Prográmalo como una:
FUNCTION de las variables (x,y)

Prepráctica



2) Programa els mètodes de Gauss-Seidel, Jacobi i de sobrerelaxació, amb una variable **icontrol** per a seleccionar el mètode emprat.

c calcula los puntos siguientes

```
do i=1,nx-1
```

```
do j=1,ny-1
```

```
if (igauss.eq.1) then
```

c Gauss Seidel

```
tnew(i,j)=(told(i+1,j)+told(i-1,j)+told(i,j+1)+told(i,j-1)
```

```
1 +rho(i,j)*dx**2)/4.d0
```

```
else if (igauss.eq.2) then
```

c SOR

```
tnew(i,j)=told(i,j)+
```

```
1 (told(i+1,j)+tnew(i-1,j)+told(i,j+1)
```

```
1 +tnew(i,j-1)+rho(i,j)*dx**2-4.d0*told(i,j))/4.d0*omegarelax
```

```
else
```

c Jacobi

```
tnew(i,j)=(tnew(i+1,j)+tnew(i-1,j)+tnew(i,j+1)+tnew(i,j-1)
```

```
1 +rho(i,j)*dx**2)/4.d0
```

```
endif
```

```
enddo
```

```
enddo
```

En este caso hay un vector de "rho". No hace falta, mejor si construimos una function **rho(x,y)**

Recorre la malla de puntos

Recordad el $dx**2$

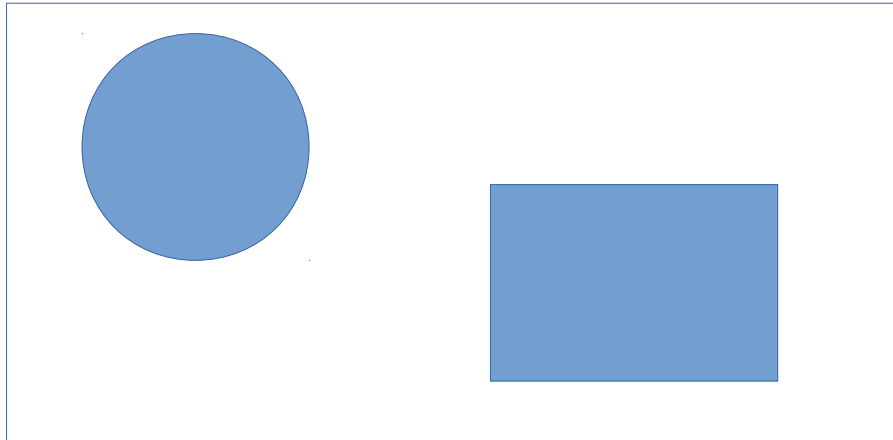
Prepráctica

- 3) Estudia la convergència de la temperatura en el punt $(x, y) = (14.5, 10.5)$ amb els 3 mètodes, fes una figura **P9-2016-figi.png** per a cada mètode, mostrant la dependència amb els valors inicials utilitzats, per exemple, $T_{\text{interior}} = 0, 120, 440$ °C. Pel cas de sobrerelaxació considera $\omega = 1.6$.

Se pide mostrar como evoluciona la temperatura de ese punto a medida que vamos iterando los métodos.

Es necesario escribir dentro del bucle de iteración.

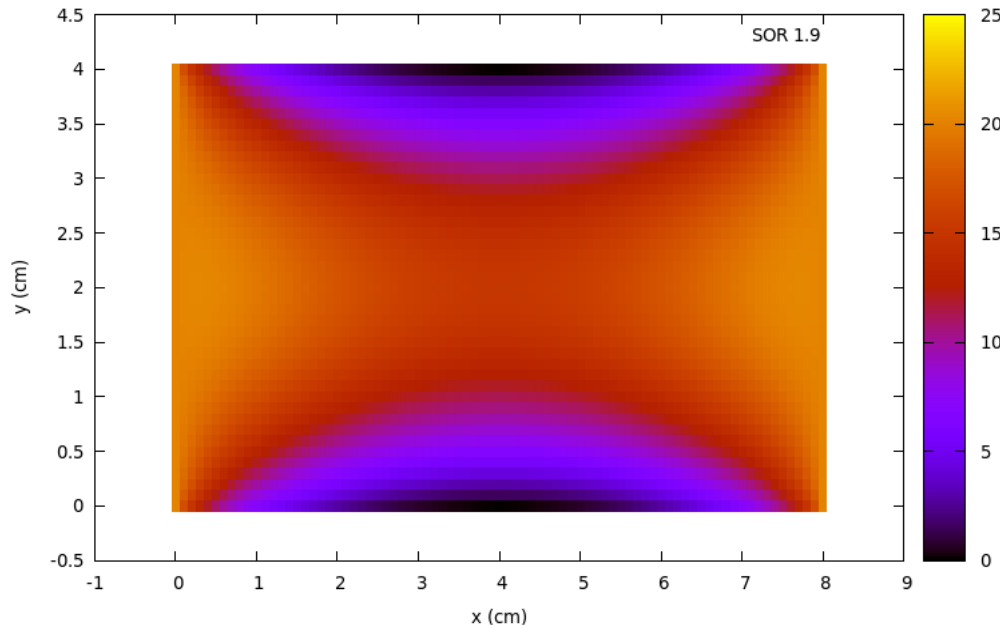
Punto “raro”. Asegúrate que tu código sabe adaptarse “rápido” si cambiamos el punto donde testeamos la convergència.



Prepráctica

4) Genera una figura 3D amb el mapa de temperatures calculat, P9-2016-fig4.png.

Genera un mapa calculado con cualquiera de los métodos una vez este “razonablemente” convergido.



Prueba con el comando:

```
set view 0,0  
sp "datos.da" u 1 :2 :3 w pm3d
```


- Otros aspectos a tener en cuenta:
 - > Qué cambios habría que hacer para poner una condición de contorno de Neumann (derivada) en uno de los lados?
 - > Las posiciones, tipo y número de fuentes cambiarán (quizá) de la prepráctica la práctica