

Métodos Computacionales en Física

Tarea 12

Patricio Cordero S.

Entregar al profe en los primeros minutos de la clase del 6 de noviembre, 2006

Integre la ecuación de Schrödinger adimensional

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i \left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi$$

Tome como condición inicial

$$\psi(x, 0) = A e^{-\mu(x-x_0)^2} e^{ibx}$$

con $\mu = 0.006$, $b = 0.3$ y $x_0 = 1500$. El potencial es nulo en todas partes excepto es $x_1 \leq x \leq x_1 + 2\Delta$ donde vale

$$V(x) = V_0 \left[1 - \cos \left(\pi \frac{x - x_1}{\Delta} \right) \right]$$

Tome $\Delta = 125$, $x_1 = 1600$ y $V_0 = 0.045$.

Se recomienda reticular el espacio en 8000 segmentos que abarquen desde $x = 0$ hasta $x = 4000$, ($h = 0.5$). Para el incremento del tiempo parece ser bueno $\varepsilon = 0.05$.

Para simplificar el problema puede aproximar $\psi_I^{1/2}$ a la parte imaginaria de $\psi(x, 0)$. Para evitar problemas lógicos no actualice los valores de ψ en los extremos (piense que corresponden a $x = \pm\infty$).

Para los tiempos $t = 0$, $t = 250$, $t = 500$ hasta $t = 2000$ tabule $P(t) = \int |\psi|^2 dx$ como función del tiempo y también para estos nueve instantes dibuje $|\psi|^2$.

- Si utiliza el algoritmo de Visscher la nota máxima es un 5. Si usa sólo el algoritmo de Crank-Nicolson la nota máxima es un 6. Si usa ambos algoritmos y los compara la nota máxima es un 7.