

1) Propiedades del Deuterón.

Utilizando las componentes relevantes del potencial V_{18} de argonne [1] ($V_{10}(r)$, $V_{10}(r) S_{12}$, $V_{1s}(r) l \cdot s$, $V_{1s2}(r) (l \cdot s)^2$, $V_{12}(r) l^2$) para el caso del deuterón ($S=1$, $T=0$, $J=1$, $=+1$), Calcular la energía de ligadura y las componentes radiales $u_0(r)$ y $u_2(r)$ de la función de onda correspondientes al estado fundamental. Dar el porcentaje de onda D hallado, así como las diferentes contribuciones a la energía de ligadura del sistema: $\langle V_{10} \rangle$, $\langle V_{10} S_{12} \rangle$, $\langle V_{12} \rangle$, $\langle V_{1s} \rangle$, $\langle V_{1s2} \rangle$ y $\langle T \rangle$.

Calcular los valores correspondientes del radio cuadrático medio, momento magnético dipolar y momento cuadrupolar eléctrico.

Notas: Utilizar las ecuaciones deducidas en clase. Se aconseja utilizar el método del tiempo imaginario para su resolución definiendo un vector global $w = (u_0, u_2)$.

RESOLUCION DE LA ECUACION DE SCHRÖDINGER
POR EL METODO DEL TIEMPO IMAGINARIO

El problema propuesto involucra la obtención de los valores y funciones propias correspondientes al estado ligado ($E < 0$) para el deuterón, $H \varphi_n = E_n \varphi_n$

Partiendo de una función inicial $\psi^{(0)}$ construimos una nueva función $\psi^{(1)}$ de la siguiente forma:

$$\psi^{(1)} = e^{-\tau H} \psi^{(0)}, \text{ si expandimos } \psi^{(0)} \text{ en la base de funciones propias } \varphi_n, \psi^{(1)} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\tau E_n} c_n \varphi_n$$

vemos que la componente de $\psi^{(0)}$ con un mayor factor de amplificación es la correspondiente al estado fundamental φ_0 . Si repetimos este proceso tomando en cada iteración como función de partida la que

acabamos de calcular, en cada paso aumentaremos la proyección de nuestra función original $\psi^{(0)}$ sobre el estado fundamental buscado (siempre que $c_0 \neq 0$!). En la práctica para asegurar una proyección no nula conviene inicializar la función de prueba $\psi^{(0)}$ con un vector aleatorio normalizado a la unidad. Además es necesario aproximar el operador $e^{-\tau H}$ por una expresión útil a efectos de cálculo. Lo más natural es realizar un desarrollo de Taylor y truncar la serie a un determinado orden (para la validez de este desarrollo es necesario que τ sea suficientemente pequeño).

Quedandonos a primer orden: $e^{-\tau H} \approx 1 - \tau H + O(\tau H)^2$, el esquema iterativo podría ser:

Inicialización: $\psi^{(0)}$

Iteración en k

$$\left[\begin{array}{ll} \psi^{(k+1)} = (1 - \tau H) \psi^{(k)} & \text{a)} \\ E_0 = \langle \psi^{(k)} | H | \psi^{(k)} \rangle & \text{b)} \\ \| H \psi^{(k)} - E_0 \psi^{(k)} \| < \epsilon & \text{c)} \\ \psi^{(k+1)} = \psi^{(k+1)} / \sqrt{\langle \psi^{(k+1)} | \psi^{(k+1)} \rangle} & \text{d)} \end{array} \right.$$

El bucle iterativo se repite hasta que el criterio de convergencia c) sea satisfecho con la tolerancia deseada ($\epsilon \leq 10^{-8}$). El algoritmo anterior proporciona el estado fundamental del operador H. Si quiere calcularse funciones propias correspondientes a estados excitados basta con incluir entre los pasos c) y d) una etapa de ortogonalización (Gramm-Schmidt) respecto de todas las autofunciones de menor energía (que deben por tanto almacenarse).