

Metodi Computazionali della Fisica

Università degli Studi di Padova

Ismaele Lorenzon

May 30, 2025

1 Introduzione

Il progetto si pone come base della prova orale per l'esame di Metodi Computazionali della Fisica, facente riferimento al dipartimento e in particolare al corso triennale in fisica presso l'Università degli Studi di Padova.

1.1 Consegna

7. Equazione di Schroedinger tempo-indipendente 2D uso dell'algoritmo di minimizzazione come CG (gradiente coniugato) implementati in `scipy` per trovare lo stato fondamentale e i primi stati eccitati. Consideriamo un potenziale a gradino e condizioni al contorno periodiche.

1.2 Obiettivo

L'obiettivo evidente è la risoluzione dell'equazione degli autovalori per l'Hamiltoniana, nel contesto dell'equazione di Schroedinger bidimensionale. La consegna non lo rende esplicito ma si rende noto vengano richiesti sia gli autostati che gli autovalori.

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (1)$$

Dove con ψ indichiamo l'autostato e con E l'energia ad esso associato.

2 Implementazione Numerica dell'Hamiltoniana

L'Hamiltoniana associata al problema in questione, è generalmente:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x, y) \quad (2)$$

Il problema viene poi numericamente semplificato tramite la scelta di costanti naturali (o atomiche) adimensionali cioè

$$\hbar = 1 \quad m = 1 \quad (3)$$

da cui le energie risultanti associate agli autostati saranno in Hartree ($\approx 27.2eV$). Considereremo un dominio rettangolare, di dimensioni L_x, L_y e discretizzato lungo ciascuna delle dimensioni in N_x, N_y segmenti di lunghezza h_x, h_y . Indicheremo poi con $\psi_{i,j}$ l'elemento dell'autostato rappresentato da un vettore di lunghezza $N_x * N_y$, atto ad "appiattare" il dominio, corrispondente alle coordinate $x = i * h_x, y = j * h_y$.