

# Laboratorio 6

17 novembre 2021

Vogliamo usare il metodo di shooting ed il propagatore di Numerov per trovare le autoenergie e gli autostati di un elettrone in una buca di potenziale infinita di lunghezza  $L$ :

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

studiamo i seguenti casi:

1. Buca piatta

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & x \leq 0, x \geq L \\ 0 & 0 < x < L \end{cases}$$

2. Potenziale a scalino

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & x \leq 0, x \geq L \\ 0 & 0 < x < a, b < x < L \\ V_0 & a < x < b \end{cases}$$

3. Potenziale armonico

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & x \leq 0, x \geq L \\ k\left(x - \frac{L}{2}\right)^2 & 0 < x < L \end{cases}$$

Il programma prima cerca gli autovalori in un range  $[E_{min}, E_{max}]$  su una griglia con spaziatura  $\Delta E$ . Poi usa l'algoritmo della bisezione per ottenere le energie degli autovalori trovati entro un errore dato dal parametro di soglia  $s$ . Usiamo unità atomiche di Hartree ( $m = 1$ ,  $\hbar = 1$ ,  $e = 1$ ) in tal modo misuriamo le distanze in raggi di Bohr e le energie in Hartree.

Per prima cosa verifichiamo che nel caso di buca piatta le energie siano pari a quelle della soluzione analitica:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n^2$$

Consiglio di usare i seguenti parametri:  $L = 10$  Bohr, numero di grid step lungo  $x$ :  $N = 1000$ ,  $E_{min} = 0$  Hr,  $E_{max} = 10$  Hr,  $\Delta E = 0.001$  Hr,  $s = 10^{-8}$  Hr,  $a = 3$  Bohr,  $b = 7$  Bohr,  $V_0 = 1$  Hr,  $k = 1$  Hr/Bohr<sup>2</sup>.