

Laboratorio 7

24 novembre 2022

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 ΔE . 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. Il programma scriverà anche dei file che riportino le auto-funzioni d'onda normalizzate.

Per prima cosa verificheremo 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/Bohr².