

# Laboratorio 8

2 dicembre 2022

Si implementi un codice per risolvere l'equazione di Schrödinger tempo dipendente in una dimensione con condizioni al contorno tali che la funzione d'onda si annulli ai bordi. Si utilizzi l'algoritmo di Crank Nicolson. Sia  $L$  la lunghezza della cella di simulazione. Si usino unità atomiche:  $\hbar = 1$ ,  $m = 1$ . La funzione d'onda iniziale è definita da:

$$\psi(x, t_0) = e^{iqx} \times e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$$

che all'inizio dovrà essere normalizzata a 1 e  $x \in [0, L]$ . Il potenziale  $V(x)$  è definito da:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < a \\ V_0 & a \leq x \leq b \\ 0 & x > b \end{cases}$$

Si considerino i seguenti parametri fisici:  $L = 500$ ,  $x_0 = 200$ ,  $q = 2$ ,  $\sigma = 20$ ,  $a = 250$ ,  $b = 260$ ,  $V_0 = 1.7$ , e i seguenti parametri di simulazione:  $N_x \geq 1000$ ,  $dt = 0.1$  e  $N_{\text{time-steps}} = 2000$ .

Si consiglia di generare dei file **animated gif** con il seguente script di GNUPLOT:

```
set terminal gif animate delay 100
set output "multiplot_animated.gif"
n = 199
do for [i=0:(n-1)] {
    set multiplot layout 1,1
    plot [][0:0.03] 'psi_tutta.dat' every :::i::i w l lw 5
    unset multiplot
}
```

Il parametro  $N_x$  può essere critico, si provi a vedere cosa succede se si sceglie  $N_x = 500$  e si verifichi poi la convergenza della simulazione per  $N_x \geq 1000$ .

Si consiglia di partire dal sorgente parziale allegato.