

Fisica Computazionale 2003-04

Laboratorio numerico

9 giugno 2004

Codice DFT per l'atomo di elio.

1. Scaricare il file `dft.tgz` che si trova in "<http://www.aquila.infn.it/htdocs/pierleoni/DFT/>" e scompattare l'archivio.
2. Il codice **hydro.f** permetterà di integrare l'eq. di S. radiale per trovarne autovalori e autofunzioni. Verificare che il codice fornisca la corretta energia dello stato fondamentale dell'atomo d'idrogeno e confrontare la soluzione corrispondente con l'autofunzione radiale analitica per lo stato **1s**.
3. Modificare il codice **hydro.f** introducendo una routine per risolvere l'equazione di Poisson radiale per il potenziale di Hartree (usare `verlet`). Verificare che la soluzione sia della forma $rV_H(r) = 1 - (1 + r)e^{-2r}$.
4. Considerare il codice **hartree.f**. Questo codice esegue il ciclo di autoconsistenza per lo stato fondamentale dell'atomo di He con il solo contributo di Hartree (senza autointerazione). Verificare che il risultato per l'energia è comparabile (anzi migliore) di quello che si ottiene con il calcolo variazionale usato in precedenza. Confrontare anche l'orbitale che si ottiene ora con quello sviluppato sulla base di GTO.
5. Considerare i due codici **exch.f** e **excorr.f** entrambi derivati da `hartree.f`. Il primo considera il termine di scambio alla Slater nel ciclo di autoconsistenza. Nel secondo la correzione di correlazione, tramite una parametrizzazione dei risultati di Ceperley-Alder, è inclusa (vedi esercizio 5.3 pg 111 di Thijssen). Confrontare energia e funzione d'onda che si ottengono con i vari livelli di approssimazione.