

Fisica Computazionale 2003-04

Laboratorio numerico

Metodo variazionale per l'atomo d'idrogeno.

1. utilizzando il codice Hatom.f calcolare l'energia e la funzione d'onda dello stato **1s** dell'atomo d'idrogeno, all'aumentare della dimensione della base. Utilizzare i valori dei coefficienti delle gaussiane di base dati nella tabella allegata.
2. il calcolo variazionale lineare del punto a) fornisce in linea di principio delle approssimazioni per gli stati eccitati. Quali?
3. Modificare il codice per ottenere le energie variazionali e le autofunzioni per gli stati eccitati possibili. Commentare i risultati ottenuti.

TABLE I. Atomic orbitals for hydrogen ($1S$).

N	α_{1s}	d_{1s}	E
2	1.332480(+0)		
	2.015287(-1)		
3	4.500225(+0)		
	6.812745(-1)		
	1.513748(-1)		
4	1.300773(+1)		
	1.962079(+0)		
	4.445290(-1)		
	1.219492(-1)		
5	3.405432(+1)		
	5.122332(+0)		
	1.164455(+0)		
	3.271926(-1)		
	1.030649(-1)		
6	8.294860(+1)		
	1.245470(+1)		
	2.833203(+0)		
	7.999973(-1)		
	2.585797(-1)		
	8.996358(-2)		
∞			-0.500000

Figure 1: Valori ottimali dei parametri α_{1s} delle gaussiane di base per l'autofunzione **1s** dell'atomo d'idrogeno