

Espalhamento a baixas energias

Escreva um programa que encontre uma solução da equação de Schrödinger para duas partículas de mesma massa interagindo através de um poço esférico atrativo,

$$V(r) = \begin{cases} -v_0 \frac{\hbar^2}{m_r R^2} & \text{para } r < R, \\ 0 & \text{para } r > R. \end{cases}$$

Considere apenas onda s ($\ell = 0$) e energia zero. Como vimos em aula, é conveniente trabalhar com unidades adimensionais (“ $\hbar = m_r = 1$ ”). A profundidade do poço v_0 deve ser uma entrada do programa. Por simplicidade, vamos tomar o alcance do poço fixo em $R = 1$.

Seu programa deve ser capaz de encontrar a função radial reduzida $u(r)$ e usá-la para calcular o comprimento de espalhamento a e o alcance efetivo r_0 .

1) Encontre v_0 tal que $a = \pm 1, \pm 10$ e $|a| \rightarrow \infty$. Não queremos nenhum estado ligado para $a < 0$ e apenas um para $a > 0$. Compare os resultados do seu programa com a expressão analítica.

2) Para os valores encontrados no item 1), qual é o valor do alcance efetivo r_0 ? Ele é igual ao alcance R ? Compare os resultados do seu programa com a expressão analítica.

3) Faça um gráfico mostrando $u(r)$ para três casos: $a < 0$, $|a| \rightarrow \infty$ e $a > 0$. Interprete geometricamente o resultado.

Instruções para a entrega

Relatório: O relatório deve ser entregue em formato pdf. O documento deverá ser em coluna única e de maneira que a fonte do texto e das figuras seja legível. Tabelas e figuras podem ser colocadas lado a lado se isso não prejudicar a leitura.

Para cada resultado, seja ele um número, tabela ou figura, deixar claro quais parâmetros de entrada foram usados no código. Em outras palavras, o texto do relatório juntamente com os códigos entregues devem ser suficientes para reproduzir todos resultados obtidos pelo aluno.

Códigos: Os códigos deverão ser entregues junto com o relatório. Além de resolver o problema proposto, espero boas práticas de programação (indentação, variáveis com nomes claros, comentários, ...).

É importante que esteja claro quais são os dados de entrada do programa e a ordem esperada. Se eles são lidos do terminal, então imprimir uma mensagem indicando o que o programa espera é

uma boa prática. Caso eles sejam lidos de um arquivo, então incluir os arquivos usados para gerar os resultados do relatório é interessante.

Linguagem de programação: a de sua preferência. Não utilizar funções e bibliotecas “prontas” para resolver equações diferenciais, diferenciação e integração numérica, e outras operações que vocês efetuarem. Exemplos do que não utilizar: `numpy.trapz` e `scipy.integrate` (Python), `NIntegrate` (Mathematica), ...

É permitido usar funções de bibliotecas que lidem apenas com manipulações de variáveis e seus tipos, como `numpy.array` (Python).

Entrega: A entrega deverá ser feita no eDisciplinas na forma de um único arquivo em formato `zip`. O nome desse arquivo deve ser:

`SFI5814_[número USP].zip`

Por exemplo, um aluno com número USP 123456789 irá submeter o arquivo `SFI5814_123456789.zip`. Os arquivos dentro do arquivo `zip` podem ter qualquer nome, desde que esteja claro o que eles representam.

Plágio: Discussões entre os alunos sobre o projeto são incentivadas. No entanto, elas devem ser sobre a física do problema e a abordagem computacional adotada. Não será tolerado nenhum tipo de plágio ou desonestidade acadêmica, incluindo (mas não limitado a): trechos do código ou do relatório idênticos, pequenas mudanças no código para disfarçar o plágio (trocar o nome de variáveis, mudar a indentação, etc), cópia de códigos de livros, artigos ou de fontes na internet, **incluindo Large Language Models (LLMs) como o ChatGPT.**