

Komputerowe Symulacje Numeryczne

Jacek Mostowicz
23.I.2005

Minimalizacja funkcji

Zadany problem:

W ćwiczeniu rozpatrywano studnię potencjału daną przepisem:

$$V(x) = -V_0 \exp(-x^2 / R^2)$$

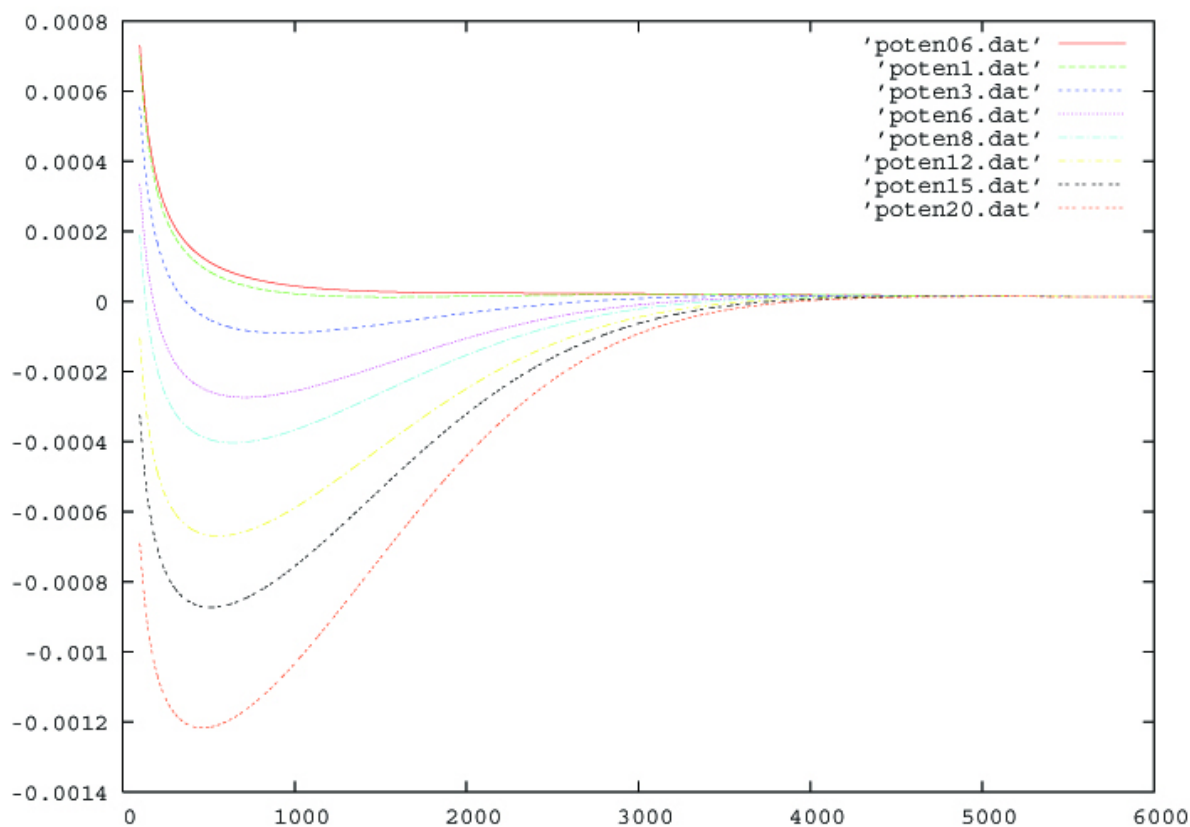
gdzie $R = 50 / 0.05292$. Należało wyznaczyć odległość pomiędzy dwoma elektronami

oddziałującymi ze sobą potencjałem $\frac{1}{|x_1 - x_2| \epsilon}$ ($\epsilon = 1.29$), dla której funkcja:

$$E_{pot}^{2e}(a) = \frac{1}{\epsilon a} - 2V_0 \exp(-a^2 / 4R^2)$$

przyjmuje najmniejszą wartość.

Poniżej przedstawiono kilka zależności $E_{pot}^{2e}(a)$ dla różnych wartości V_0 .



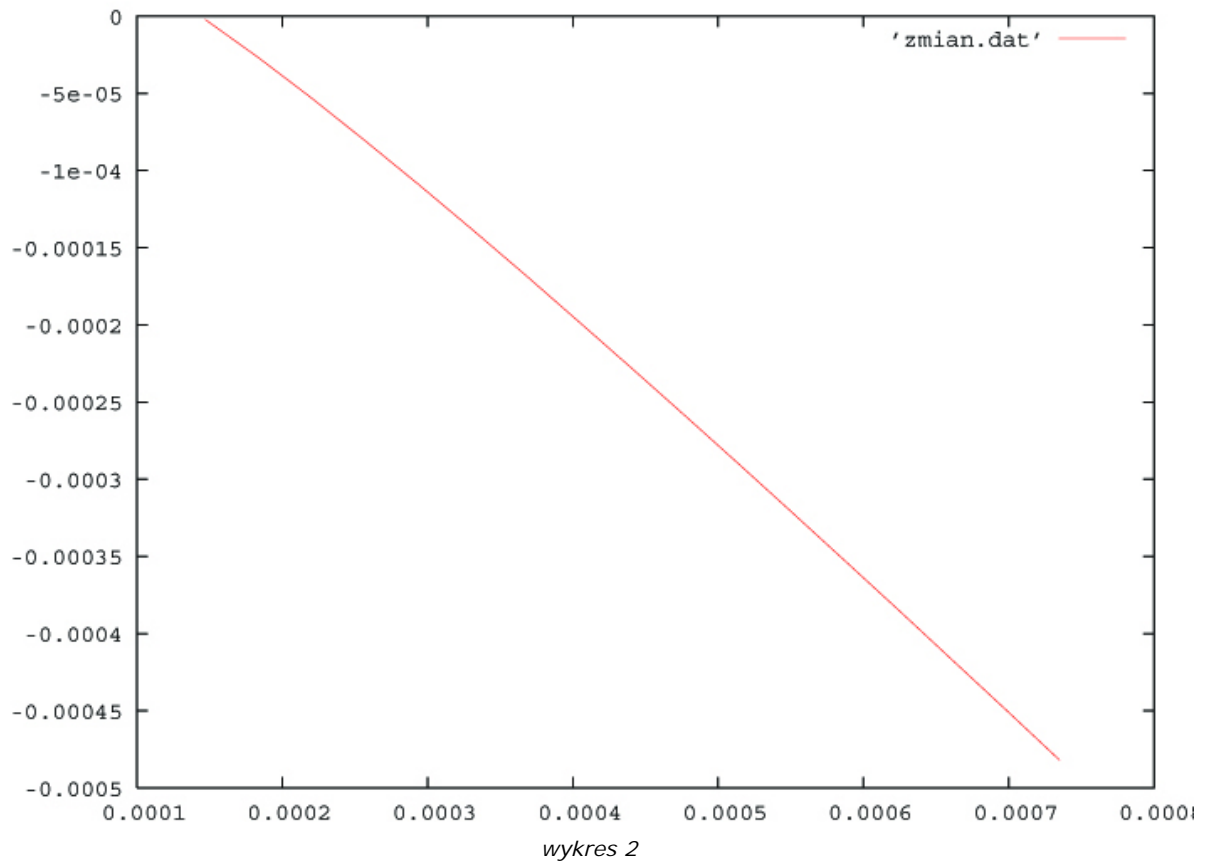
wykres 1

Aby układ związał się energia musi posiadać minimum i dodatkowo $E_{wiazania}^{2e} < 0$. Energia wiązana dana jest wzorem:

$$E_{wiazania}^{2e}(V_0) = \min(E_{pot}^{2e}(a)) + V_0$$

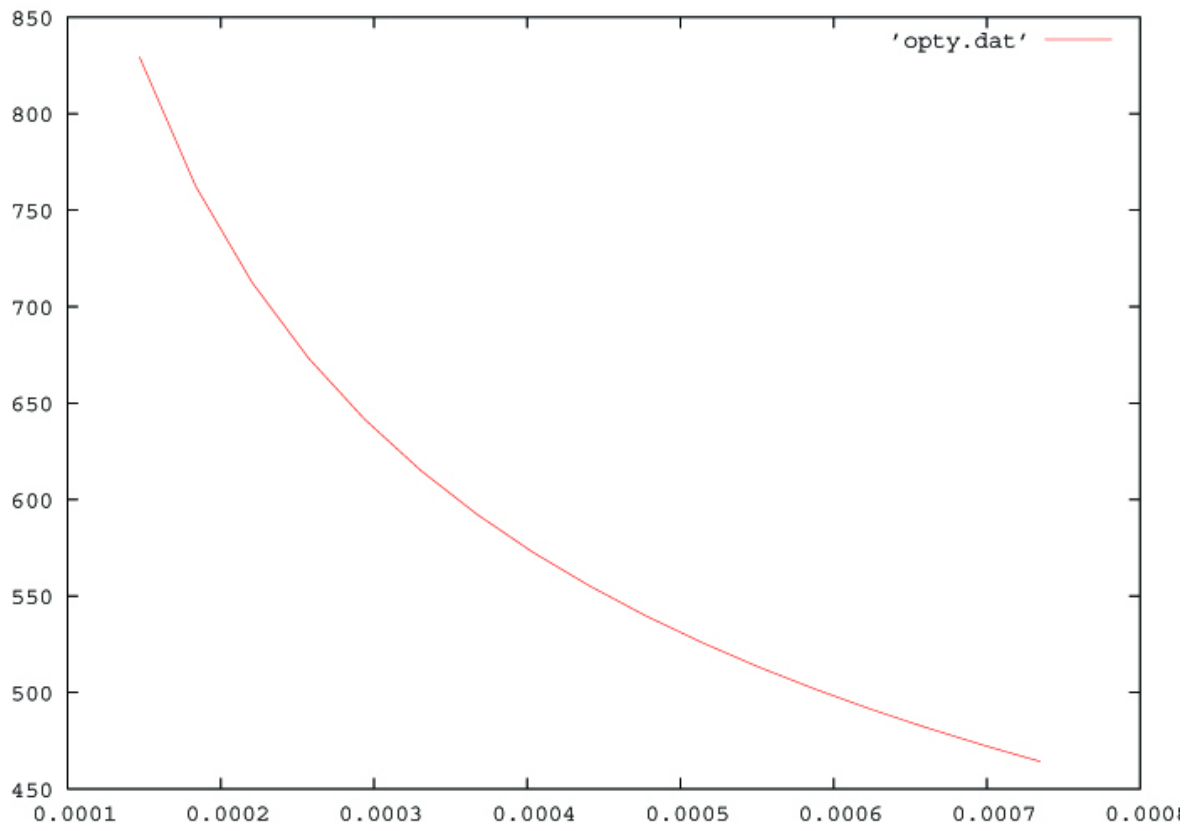
który jest zilustrowany na wykresie poniżej.

V_0 należy do przedziału $\left[\frac{4}{27211.6}; \frac{20}{27211.6} \right]$



Z wykresu 1 widać, że już dla stanu $V_0 = \frac{4}{27211.6}$ mamy do czynienia z ujemną energią wiązania.

Dodatkowo należało wyznaczyć a_{opt} . Dane zebrano na poniższym wykresie.



Dla wartości $V_0 = \frac{20}{27211.6}$ wyznaczono $a_{opt} \approx 464$.