Universidade Estadual de Campinas

Exemplos pelo Método Variacional

Willian Vieira dos Santos – RA: 086202
Prof. Dr. Marco Aurélio Pinheiro Lima

FI002 – Mecânica Quântica

06/09/2020

OH – Estado Fundamental

- Usar o método variacional para estimar energia do estado fundamental do oscilador harmônico 1D (Zettili)

O Hamiltoniano é $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$

Energia conhecida $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$

A função teste pode ser uma gaussiana com parâmetro a

$$\psi_0(x, a) = Ae^{-ax^2} \qquad (1)$$

onde A é a constante de normalização e em termos do parâmetro a

$$A = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$$

OH – Estado Fundamental

A expressão para $E_0(a)$ é dada por

$$\langle\psi_0|H|\psi_0\rangle = A^2\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2}\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)e^{-\alpha x^2}dx$$

$$= A^2\frac{\hbar^2\alpha}{m}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\alpha x^2}dx + A^2\left(\frac{1}{2}m\omega^2-\frac{2\hbar^2\alpha^2}{m}\right)\int_{-\infty}^{+\infty} x^2e^{-2\alpha x^2}dx$$

$$= \frac{\hbar^2\alpha}{m}+\frac{1}{4\alpha}\left(\frac{1}{2}m\omega^2-\frac{2\hbar^2\alpha^2}{m}\right) = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha+\frac{m\omega^2}{8\alpha}$$

Logo, a energia é

$$E_0(\alpha) = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha+\frac{m\omega^2}{8\alpha} \qquad (2)$$

OH – Estado Fundamental

Em seguida, minimizamos $E_0(a)$ relação ao parâmetro a

$$\frac{\partial E_0(\alpha)}{\partial \alpha} = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{8\alpha^2} = 0$$

Encontramos $a = \frac{m\omega}{2\hbar}$

Substituindo em (1) e (2), obtemos

$$\psi_0(x, a) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/2\hbar} \qquad E_0(a) = \frac{\hbar\omega}{2}$$

A energia no estado fundamental obtida pelo método variacional é a mesma ao obtido exatamente

OH – 1° Estado Excitado

- Estimar energia do 1° estado excitado do oscilador harmônico 1D (Zettili)

Energia conhecida $E_1 = \frac{3\hbar\omega}{2}$

A função teste precisa ser ímpar, com um nó e ortogonal a ψ_0 .
Assim escolhemos:

$$\psi_1(x, a) = Bxe^{-ax^2} \qquad (3)$$

onde B é a constante de normalização que em termos de a

$$B = \left(\frac{32a^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$$

Observe que as funções testes são funções bem comportadas, ou seja, tendem a zero quando x tende ao infinito

OH – 1° Estado Excitado

A expressão para $E_1(a)$ é dada por

$$\langle \psi_1(\alpha)|H|\psi_1(\alpha)\rangle = B^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-\alpha x^2} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] x e^{-\alpha x^2} dx$$

$$= \frac{3\hbar^2}{2m}\alpha + \frac{3m\omega^2}{8\alpha}$$

Logo, a energia é

$$E_1(a) = \frac{3\hbar^2}{2m} a + \frac{3m\omega^2}{8a} \qquad (4)$$

Minimizamos $E_1(a)$ relação ao parâmetro a

$$\frac{\partial E_1(a)}{\partial a} = \frac{3\hbar^2}{2m} - \frac{3m\omega^2}{8a^2} = 0$$

OH – 1° Estado Excitado

Encontramos $a = \frac{m\omega}{2\hbar}$

Substituindo em (3) e (4), obtemos

$$\psi_1(x, \alpha_0) = \left(\frac{4m^3\omega^3}{\pi\hbar^3}\right)^{1/4} x e^{-m\omega x^2/2\hbar} \qquad E_1(\alpha_0) = \frac{3\hbar\omega}{2}$$

A energia no 1° estado excitado obtida pelo método variacional é a mesma ao obtido exatamente

Potencial função-Delta

- Estimar energia do estado fundamental da função-Delta (Griffiths)

Energia conhecida $E_g = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$

A função teste será novamente uma gaussiana

$$\psi_g(x,b) = Ae^{-bx^2}$$

onde A é a constante de normalização que já pode ser obtido em relação ao parâmetro b:

$$1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2}\,dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2b}} \Rightarrow A = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4}$$

Potencial função-Delta

O Hamiltoniano é dada por <*H*> = <*T*> + <*V*> :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - \alpha\delta(x)$$

$$\langle T\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}|A|^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2}\frac{d^2}{dx^2}\left(e^{-bx^2}\right)dx = \frac{\hbar^2 b}{2m}$$

$$\langle V\rangle = -\alpha|A|^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2}\delta(x)\,dx = -\alpha\sqrt{\frac{2b}{\pi}}$$

$$\langle H\rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} - \alpha\sqrt{\frac{2b}{\pi}}$$

Potencial função-Delta

Temos minimizar <*H*> em relação ao parâmetro b

$$\frac{d}{db}\langle H\rangle = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi b}} = 0 \;\Rightarrow\; b = \frac{2m^2\alpha^2}{\pi\hbar^4}$$

$$\langle H\rangle_{\min} = -\frac{m\alpha^2}{\pi\hbar^2}$$

A energia obtida pelo método variacional é maior (pelo sinal negativo) que a exata E_g pois $\pi > 2$

OH – Estado Fundamental (2)

- Estimar energia do estado fundamental do oscilador harmônico 1D a partir de uma função teste diferente da gaussiana (Griffiths)

$$\psi(x) = \frac{A}{x^2 + b^2}$$

Normalizando

$$1 = 2|A|^2 \int_0^\infty \frac{1}{(x^2+b^2)^2} dx = 2|A|^2 \frac{\pi}{4b^3} = \frac{\pi}{2b^3}|A|^2. \quad A = \sqrt{\frac{2b^3}{\pi}}.$$

Em seguida

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}|A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(x^2+b^2)} \frac{d^2}{dx^2}\left(\frac{1}{(x^2+b^2)}\right) dx$$

$$= -\frac{4\hbar^2 b^3}{\pi m}\left[3\frac{3\pi}{16b^5} - 4b^2\frac{5\pi}{32b^7}\right] = \frac{\hbar^2}{4mb^2}.$$

OH – Estado Fundamental (2)

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} m\omega^2 |A|^2 \, 2 \int_0^\infty \frac{x^2}{(x^2+b^2)^2} dx = m\omega^2 \frac{2b^3}{\pi} \frac{\pi}{4b} = \frac{1}{2} m\omega^2 b^2$$

$$\langle H \rangle = \frac{\hbar^2}{4mb^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 b^2$$

Minimizando <H> em relação ao parâmetro b

$$\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial b} = -\frac{\hbar^2}{2mb^3} + m\omega^2 b = 0 \Longrightarrow \cdot \, b^2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{m\omega}$$

Obtemos

$$\langle H \rangle_{\min} = \frac{\hbar^2}{4m} \frac{\sqrt{2} m\omega}{\hbar} + \frac{1}{2} m\omega^2 \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{m\omega} = \hbar\omega \left(\frac{\sqrt{2}}{4} + \frac{1}{2\sqrt{2}} \right) = \frac{\sqrt{2}}{2} \hbar\omega \; > \frac{1}{2} \hbar\omega$$

Referências

- D. J. Griffiths, "Introduction to Quantum Mechanics", Prentice Hall, 1995

- N. Zettili, "Quantum Mechanics Concepts and Applications", 2nd Edition, John Wiley, 2009