

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA  
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICO-QUÍMICA

UTILIZAÇÃO DO MÉTODO VARIACIONAL LINEAR  
PARA OBTENÇÃO DA ENERGIA DO ESTADO FUN-  
DAMENTAL DE UM SISTEMA DE 2 BÓSONS INTE-  
RAGINDO ATRAVÉS DO POTENCIAL DE BARBANIS.

TESE SUBMETIDA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA  
PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS.

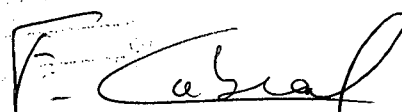
BARTIRA CABRAL DA SILVEIRA GRANDI

JULHO - 1981

UTILIZAÇÃO DO MÉTODO VARIACIONAL LINEAR PARA OBTENÇÃO DA ENERGIA DO ESTADO FUNDAMENTAL DE UM SISTEMA DE 2 BÓSONS INTERAGINDO ATRAVÉS DO POTENCIAL DE BARBANIS.

BARTIRA CABRAL DA SILVEIRA GRANDI

ESTA DISSERTAÇÃO FOI JULGADA E APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELO ORIENTADOR E MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA.



---

PROF. FERNANDO CABRAL, Ph.D.  
ORIENTADOR



---

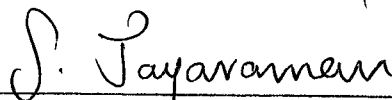
PROF. FARUK J. NOME AGUILERA, Ph.D.  
COORDENADOR

BANCA EXAMINADORA:



---

PROF. FERNANDO CABRAL, Ph.D.



---

PROF. SUBRAMANIA JAYARAMAN, Ph.D.



---

PROF. VITOR HUGO F. DOS SANTOS, Ph.D.

Aos Meus Pais

## AGRADECIMENTOS

Meus agradecimentos

Ao Prof. Fernando Cabral, pela orientação deste trabalho;

Ao Tarciso, pelo incentivo sempre presente;

Aos meus amigos e colegas, pela atenção e apoio;

Ao Carlos Duarte, pelo cuidadoso trabalho de datilografia.

## RESUMO

Neste trabalho, o método variacional linear é utilizado para obter a energia do estado fundamental de 2 bósons que interagem por um potencial central. Dois tipos de interação são considerados: o poço quadrado em 3 dimensões com repulsão (carroço), que tem solução analítica e serve como teste para o método e o potencial do oscilador harmônico bidimensional com perturbação.

Para o potencial do tipo poço quadrado, que é uma aproximação simples para o potencial de Lennard-Jones e para potenciais nucleares, utiliza-se dois tipos de função de onda tentativa para descrever o sistema. A primeira é uma expansão linear em termos de funções não ortogonais e a outra uma expansão em termos de funções ortogonais. Verifica-se que a base ortogonal é mais adequada para o cálculo da energia.

Para o oscilador harmônico com perturbação do tipo  $axy^2$  (hamiltoniano de Barbanis), a função de onda tentativa é uma expansão em termos de funções ortonormais. Os resultados obtidos estão de acordo com os valores calculados por outros métodos e demonstram a validade do método empregado.

ABSTRACT

In this work, the linear variational method is used to obtain the ground state energy of two bosons interacting by a central potential. Two types of interaction are considered: the three dimensional square well with core, which has analytical solution and can be used as a test for the method and the two dimensional harmonic oscillator potential with perturbation.

For the square well potential, which is a simple approximation for the Lennard-Jones potential and for nuclear potentials, two types of trial wave functions are used to describe the system. The first is a linear expansion in terms of non orthogonal functions and the second is an expansion in terms of orthogonal functions. It is verified that the orthogonal basis set is more suitable to calculate the energy.

For the harmonic oscillator with a perturbation of the form  $\alpha x y^2$  (Barbanis hamiltonian) the trial wave function is an expansion in terms of orthonormal functions. The results obtained are in agreement with the values calculated by other methods and demonstrate the validity of method.

Í N D I C E

RESUMO .....	v
ABSTRACT .....	vi
INTRODUÇÃO .....	1
<b>I - MÉTODO VARIACIONAL LINEAR</b>	
1. Método variacional .....	3
2. Exemplos .....	6
2.1. Átomo de hidrogênio .....	6
2.2. Átomo de hélio .....	8
3. Método variacional linear .....	9
<b>II - POTENCIAL TIPO POÇO QUADRADO</b>	
1. Introdução .....	17
2. Funções utilizadas .....	18
3. Resultados obtidos .....	22
<b>III - POTENCIAL TIPO BARBANIS</b>	
1. Introdução .....	32
2. Funções utilizadas .....	33
3. Resultados obtidos .....	35
CONCLUSÃO .....	48
APÊNDICE A .....	52
APÊNDICE B .....	55
APÊNDICE C .....	56
APÊNDICE D .....	59
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	64

## INTRODUÇÃO

O método variacional linear<sup>[1]</sup>, entre outros métodos conhecidos, permite que se obtenha uma energia aproximada para o estado fundamental de um determinado sistema que não tenha solução analítica facilmente encontrável; obtém-se também uma expressão aproximada para a função de onda do sistema (a função variação) no seu estado fundamental. Neste trabalho este método é aplicado a dois sistemas em particular: o primeiro sistema estudado é o de 2 bósons que interagem através de um potencial tipo poço quadrado com repulsão (caroço rígido)<sup>[1]</sup> e o segundo é o de 2 bósons que interagem através do potencial de Barbanis<sup>[2]</sup>.

O Capítulo I trata do embasamento teórico sobre o método variacional e, em particular, sobre o método variacional linear, apresentando, também, exemplos da aplicação deste método. O programa utilizado no processo de diagonalização das matrizes calculadas é o programa originalmente escrito por Franklin Prosser.

No Capítulo II, o método variacional linear é aplicado ao sistema de 2 bósons que interagem através de um potencial tipo poço quadrado tridimensional com repulsão; para este sistema, duas funções variação são utilizadas: a primeira é uma combinação linear em termos de uma base não ortonormal e a segunda é uma combinação linear em termos de uma base ortonormal. Tal sistema, com as funções variação escolhidas, é estudado, em 1º lugar, como um teste para o método escolhido e, em 2º lugar, para se verificar a conveniência ou não da utilização de uma base não ortonormal na expansão que compõe a função variação.

O segundo sistema, tratado no Capítulo III, é o de 2



bósons interagindo através de um potencial de Barbanis bidimensional. Inicialmente analisa-se o caso em que este potencial apresenta uma isotropia quanto às frequências de oscilação nas duas direções de movimento ( $k_x = k_y = k$ ): é o chamado potencial de Barbanis isotrópico; o caso em que ocorre anisotropia nas frequências de oscilação ( $k_x \neq k_y$ ), aqui denominado potencial de Barbanis anisotrópico, é também analisado, e os resultados obtidos, energia do estado fundamental e dos primeiros estados excitados, para os dois casos, isotrópico e anisotrópico, são apresentados e, quando possível, comparados com valores encontrados na literatura. A análise deste potencial é importante por sua aplicação em física molecular [ 2 ] .

Por fim, nas conclusões, é feita uma análise mais aprofundada dos resultados obtidos, salientando-se a importância da escolha de uma base ortonormal para compor a função variação escolhida, o que fornecerá resultados mais precisos no cálculo da energia. Algumas aplicações do trabalho realizado são apresentadas.

# I - MÉTODO VARIACIONAL LINEAR

## 1 - MÉTODO VARIACIONAL

Um sistema conservativo, que possui um hamiltoniano  $H(p, q)$  independente do tempo, é descrito pela equação de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_n(q) + V(q) \Psi_n(q) = \epsilon_n \Psi_n(q) , \quad (\text{I.1})$$

onde  $\Psi_n(q)$  é a função de onda que representa o  $n$ -ésimo estado quântico estacionário do sistema e  $\epsilon_n$  é a energia deste estado. A função de onda  $\Psi_n(q)$  deve ser contínua, finita e ter valor único através do espaço de configuração do sistema, além de refletir as propriedades de simetria do hamiltoniano do sistema.

A energia  $\epsilon_n$ , na eq. (I-1), pode ser obtida pela relação:

$$\epsilon_n = \frac{\int \Psi_n^*(q) H \Psi_n(q) d\tau}{\int \Psi_n^*(q) \Psi_n(q) d\tau} , \quad (\text{I-2})$$

sendo  $\Psi_n^*(q)$  o conjugado de  $\Psi_n(q)$  e a integração tomada sobre todo o espaço.

Há muitas situações físicas nas quais o cálculo exato da função de onda que representa um determinado sistema quântico é muito complicado. Como a energia é uma grandeza física de grande interesse, a dificuldade em encontrar seu valor deixa uma grande lacuna na caracterização de sistemas quânticos que não permitem o cálculo analítico das funções de onda que os descrevem. O método variacional, entre outros métodos conhecidos, permite que se calcule um valor aproximado para a energia de

tais sistemas quânticos, utilizando no lugar da função de onda exata, uma função tentativa  $\Phi(q)$ , também denominada função variação, que satisfaça às condições mencionadas no início deste capítulo (condições para uma função de onda estacionária): ser contínua, finita e de valor único através do espaço de configuração do sistema, e refletir as propriedades de simetria do hamiltoniano do sistema, sendo no mais completamente arbitrária.

O valor médio do hamiltoniano (eq. (I-2)) pode ser calculado utilizando-se a função tentativa  $\Phi(q)$ , obtendo-se uma energia tentativa  $E_t$ :

$$E_t = \frac{\int \Phi^*(q) H \Phi(q) d\tau}{\int \Phi^*(q) \Phi(q) d\tau} \quad (I.3)$$

Se  $\Phi(q)$  é uma função tentativa que representa, aproximadamente, o  $n$ -ésimo estado quântico do sistema em consideração, então a energia calculada através da eq. (I.3) é um limite para a energia  $\epsilon_n$  calculada em (I.2). [1]

Considere-se um sistema quântico, com hamiltoniano  $H(p,q)$ , que tem soluções dadas pelo conjunto de equações

$$H v_i(q) = \epsilon_i v_i(q) \quad (I.4)$$

Como o conjunto das funções  $v_i(q)$ , isto é,  $\{v_i(q), i=1,2,\dots,N\}$ , forma um conjunto completo, podemos expandir a função tentativa em termos desta base [1]:

$$\Phi = \sum_i c_i v_i(q) \quad (I.5a)$$

com

$$\sum_i c_i^* c_i = 1 \quad (I.5b)$$

Substituindo, na eq. (I.3), a expressão para  $\Phi(q)$ , e

lembrando que  $\{v_i(q), i = 1, 2, \dots, N\}$  é um conjunto completo ortonormal, chega-se à expressão:

$$E_t = \sum_{i,j} c_i^* c_j \int v_i^*(q) H v_j(q) d\tau = \sum_i c_i^* c_i \epsilon_i \quad (I.6)$$

Subtraindo, em ambos os lados de (I.6), a energia do estado fundamental  $\epsilon_0$ , chega-se à expressão:

$$E_t - \epsilon_0 = \sum_i c_i^* c_i (\epsilon_i - \epsilon_0) \quad (I.7)$$

Como  $\epsilon_i$ , a energia do  $i$ -ésimo estado do sistema, é maior ou igual a  $\epsilon_0$ , e as quantidades  $c_i^* c_i$  são todas positivas ou nulas, conclui-se que:

$$E_t \geq \epsilon_0 \quad (I.8)$$

Portanto,  $E_t$  é um limite superior para a energia do estado fundamental do sistema.

Escolhendo-se várias funções variação

$$\phi_1, \phi_2, \phi_3, \dots$$

e calculando-se as correspondentes energias

$$E_{1t}, E_{2t}, E_{3t}, \dots$$

através da eq. (I.3), cada uma delas será um limite superior para a energia  $\epsilon_0$ , sendo que a menor delas será a mais próxima de  $\epsilon_0$ .

Se as funções variação  $\phi_1, \phi_2, \phi_3, \dots$  diferem entre si apenas por terem valores diferentes de um parâmetro, isto é,  $\phi = \phi(\lambda_j)$ , estes parâmetros são denominados parâmetros variacionais e, a fim de se encontrar a melhor forma para a função variação, pode-se minimizar a energia em relação a  $\lambda_j$  ( $\frac{\partial E_t}{\partial \lambda_j} = 0$ ); a

melhor função variação levará ao valor mais próximo de  $\epsilon_0$ . Quanto mais flexível for a forma desta função variação, isto é, quanto maior o número de parâmetros variacionais nela contidos, e quanto mais criteriosa for sua escolha, mais próximo se chegará do valor exato  $\epsilon_0$ .

Calculada a energia  $E_t$  através de funções tentativas de formas diferentes, e sendo esta próxima da energia  $\epsilon_0$ , deve-se ter cuidado em escolher qual a função variação  $\Phi(q)$  que mais se aproxima da função de onda verdadeira do sistema, visto que nem sempre a função de onda que dá o valor de  $E_t$  mais próximo de  $\epsilon_0$  será a função de onda que dará o melhor resultado no cálculo de outras grandezas físicas, como se pode ver no exemplo do cálculo variacional aplicado ao estado fundamental do átomo de hidrogênio [3].

## 2 - EXEMPLOS

### 2.1 - Átomo de Hidrogênio

Aplicando-se o método variacional para o cálculo da energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio, cujo hamiltoniano é dado por: [3]

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} \quad , \quad (I.9a)$$

e com uma função variação do tipo:

$$\Phi = a_0^{-3/2} \frac{u(\rho)}{\rho} y_l^m(\theta, \phi) \quad , \quad (I.9b)$$

onde:  $\mu$  é a massa reduzida do sistema,

$\hbar = h/2\pi$  é a constante de Planck dividida por  $2\pi$ ,

$r$  é a distância entre o elétron e o núcleo,

$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$  = raio da menor órbita no átomo de hidrogênio,

$\rho = \frac{Zr}{a_0}$  ( $Z = 1$  para o átomo de Hidrogênio)

chega-se à equação:

$$E_t = -E_H \frac{\int_0^\infty u^* \left[ \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} \right] u \, d\rho}{\int_0^\infty |u|^2 \, d\rho}, \quad (\text{I.10})$$

onde  $E_H = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} = 13,530 \text{ eV}^{[4]}$ .

Limitando o estudo para estados - s ( $\ell = m = 0$  → estado fundamental) e calculando os valores estacionários da energia para cinco funções variação diferentes:

$$\begin{aligned} u_1 &= \rho e^{-\lambda\rho} \text{ que, para } \lambda = 1, \text{ é a função de onda exata,} \\ u_2 &= \rho e^{-\lambda\rho^2}, \\ u_3 &= \rho^2 e^{-\lambda\rho}, \\ u_4 &= \frac{\rho}{\lambda^2 + \rho^2}, \\ u_5 &= \rho^2 e^{-\lambda\rho^2}, \end{aligned} \quad (\text{I.11})$$

cujas formas estão representadas na figura (I.1), chega-se aos valores contidos na tabela (I.1). Observa-se, nitidamente, que  $E_t$  está mais próximo do valor real,  $E_H$ , quando utilizamos a função  $u_1$ . A função  $u_4$ , embora forneça um razoável valor para  $E_t$ , no cálculo de  $\langle r \rangle_t$  ela diverge completamente, o que já não

ocorre se uso é feito, para tal fim, da função  $u_3$ . A função  $u_2$  fornece um resultado mais satisfatório do que  $u_4$  para o cálculo de  $E_t$  e de  $\langle r \rangle_t$ . A função  $u_5$  fornece um mau resultado tanto para  $E_t$  como para  $\langle r \rangle_t$ . A razão  $(E_t - \epsilon_0)/(\epsilon_1 - \epsilon_0)$  é uma boa medida do erro envolvido no cálculo variacional da energia do estado fundamental. O melhor resultado é aquele apresentado por  $u_1$ , logo seguida de  $u_2$ ; os piores resultados estão em  $u_3$  e  $u_5$  devido ao comportamento na origem ser proporcional a  $\rho^2$ .

## 2.2 - Átomo de Hélio

Utilizando, como função variação, a função de onda de ordem zero para átomos hidrogenóides de carga nuclear " $Z'e$ "<sup>[3]</sup>:

$$\Phi = \psi_1 \psi_2 = \left[ \frac{Z'^3}{\pi a_0^3} \right] e^{-Z'\rho_1} e^{-Z'\rho_2}, \quad (I.12)$$

onde  $Z'$ , o número atômico efetivo, é o parâmetro variacional e sabendo-se que o hamiltoniano do sistema é:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - Ze^2 \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{e^2}{r_{12}}, \quad (I.13)$$

com:  $Z$  = número atômico,

$r_{12}$  = distância relativa entre os elétrons,

e  $\psi_1$  e  $\psi_2$  satisfazendo à equação do tipo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = Z' \frac{e^2}{r} \psi - Z'^2 E_H \psi, \quad (I.14)$$

para  $E_H$  definido como na seção 2.1, chega-se à expressão:

$$E_t = -2Z'^2 E_H + 2(Z' - Z) E_H \int \Phi^* \left( \frac{1}{\rho_1} + \frac{1}{\rho_2} \right) \Phi d\tau +$$

$$+ \frac{1}{a_0} \int \phi^* \frac{e^2}{\rho} \phi d\tau , \quad (I.15)$$

sendo que  $\rho = \frac{r_{12}}{a_0}$  ,  $\rho_1 = \frac{r_1}{a_0}$  ,  $\rho_2 = \frac{r_2}{a_0}$  e  $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$  .

A primeira integral dá, como resultado,  $4Z'E_H$  (ver apêndice A ) e a segunda resulta em  $\frac{5}{4}Z'E_H$  (ver apêndice A ). Substituindo-se estes valores em (I-15), e minimizando em relação a  $Z'$ :

$$E_t = [2Z'^2 + \frac{5}{4}Z' - 4ZZ'] E_H , \quad (I.16)$$

$$\frac{\partial E_t}{\partial Z'} = 4Z' + \frac{5}{4} - 4Z = 0 , \quad (I.17)$$

o que dá como valor de  $Z'$ :

$$Z' = Z - \frac{5}{16} , \quad (I.18)$$

resultando:

$$E_t = -2 \left( Z - \frac{5}{16} \right)^2 E_H .$$

### 3 - MÉTODO VARIACIONAL LINEAR

O método variacional linear caracteriza-se por ter, como função variação, uma combinação linear de  $N$  funções conhecidas [1], isto é:

$$\phi = \sum_{i=1}^N c_i \phi_i = c_1 \phi_1 + c_2 \phi_2 + \dots + c_N \phi_N . \quad (I.19)$$



Agora, os parâmetros variacionais são os coeficientes  $c_i$ , além de outros parâmetros que podem estar incluídos nas próprias  $\phi_i$ . Deve-se, então, determinar estes coeficientes,  $c_1, c_2, \dots, c_N$ , de tal forma a fornecerem o menor valor para  $E_t$  e, portanto, o valor mais próximo da energia do estado fundamental do sistema representado por  $\Phi$ . Novamente, a escolha do conjunto base,  $\{\phi_i, i = 1, 2, \dots, N\}$ , é completamente arbitrária, desde que suas funções satisfaçam as condições de serem contínuas, de valor único e finitas em todo o espaço de configuração do sistema, além de refletirem as propriedades de simetria do hamiltoniano do sistema.

Substituindo-se, então, a eq. (I-19) na eq. (I.3), obtém-se:

$$E_t = \frac{\sum_{i,j} c_i^* c_j \int \phi_i^* H \phi_j d\tau}{\sum_{i,j} c_i^* c_j \int \phi_i^* \phi_j d\tau} \quad (I.20)$$

Usando a notação [ ]:

$$H_{ij} = \int \phi_i^* H \phi_j d\tau \quad e \quad (I.21a)$$

$$\Delta_{ij} = \int \phi_i^* \phi_j d\tau \quad , \quad (I.21b)$$

a eq. (I.20) toma a forma:

$$E_t = \frac{\sum_{i,j=1}^N c_i^* c_j H_{ij}}{\sum_{i,j=1}^N c_i^* c_j \Delta_{ij}} \quad (I.22)$$

Para que os  $c_k$ 's que tornam  $E_t$  mínimo sejam encontrados, a eq. (I.22) deve ser diferenciada com respeito a cada  $c_k$ . Lembrando que  $\frac{\partial E_t}{\partial c_k} = 0$  é condição de mínimo e fixando um dos  $i = k$ , che-

ga-se à expressão:

$$\sum_{j=1}^N c_j (H_{kj} - \Delta_{kj} E_t) = 0, \quad k = 1, 2, \dots, N, \quad (\text{I.23})$$

que fornece um conjunto de  $N$  equações lineares homogêneas com  $N$  variáveis independentes  $c_1, c_2, \dots, c_N$ . Para que (I.23) tenha solução diferente da trivial, é necessário que o determinante dos coeficientes se anule. Obtém-se assim a equação secular:

$$\begin{vmatrix} H_{11} - \Delta_{11}E_t & H_{12} - \Delta_{12}E_t & \dots & H_{1N} - \Delta_{1N}E_t \\ H_{21} - \Delta_{21}E_t & H_{22} - \Delta_{22}E_t & \dots & H_{2N} - \Delta_{2N}E_t \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ H_{N1} - \Delta_{N1}E_t & H_{N2} - \Delta_{N2}E_t & \dots & H_{NN} - \Delta_{NN}E_t \end{vmatrix} = 0, \quad (\text{I.24})$$

que, ao ser resolvida, fornece os valores da energia. A menor raiz é o limite superior de  $\epsilon_0$ . Substituindo-se  $E_{0t}$ , a menor raiz de (I.24), nas equações em (I.23), resolve-se este sistema em termos do coeficiente  $c_1$ , que pode ser usado como fator de normalização: o resultado desta substituição é a função variação  $\phi_0$  correspondente a  $E_{0t}$ . As demais raízes  $E_{1t}, E_{2t}, \dots, E_{N-1t}$  são os limites superiores para  $\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_{N-1}$ <sup>[1]</sup>. Quanto maior o número de funções no conjunto base, isto é, quanto maior  $N$ , mais preciso será o resultado.

No caso em que o conjunto base possui somente uma função, a equação secular tem a forma:

$$H - \Delta E = 0, \quad (\text{I.25})$$

que é a mesma equação (I.3). Na equação acima,  $H$  e  $\Delta$  são aqueles definidos em (I.21).

Quando o conjunto base é composto por  $N$  funções ortogonais, a equação secular tem a forma:

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E_t & H_{12} & H_{13} & \dots & H_{1N} \\ H_{21} & H_{22} - E_t & H_{23} & \dots & H_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ H_{N1} & H_{N2} & H_{N3} & \dots & H_{NN} - E_t \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{I.26})$$

Neste caso, somente os termos da diagonal principal, isto é, somente para  $i = j$ , terão o termo referente à ortonormalização, já que

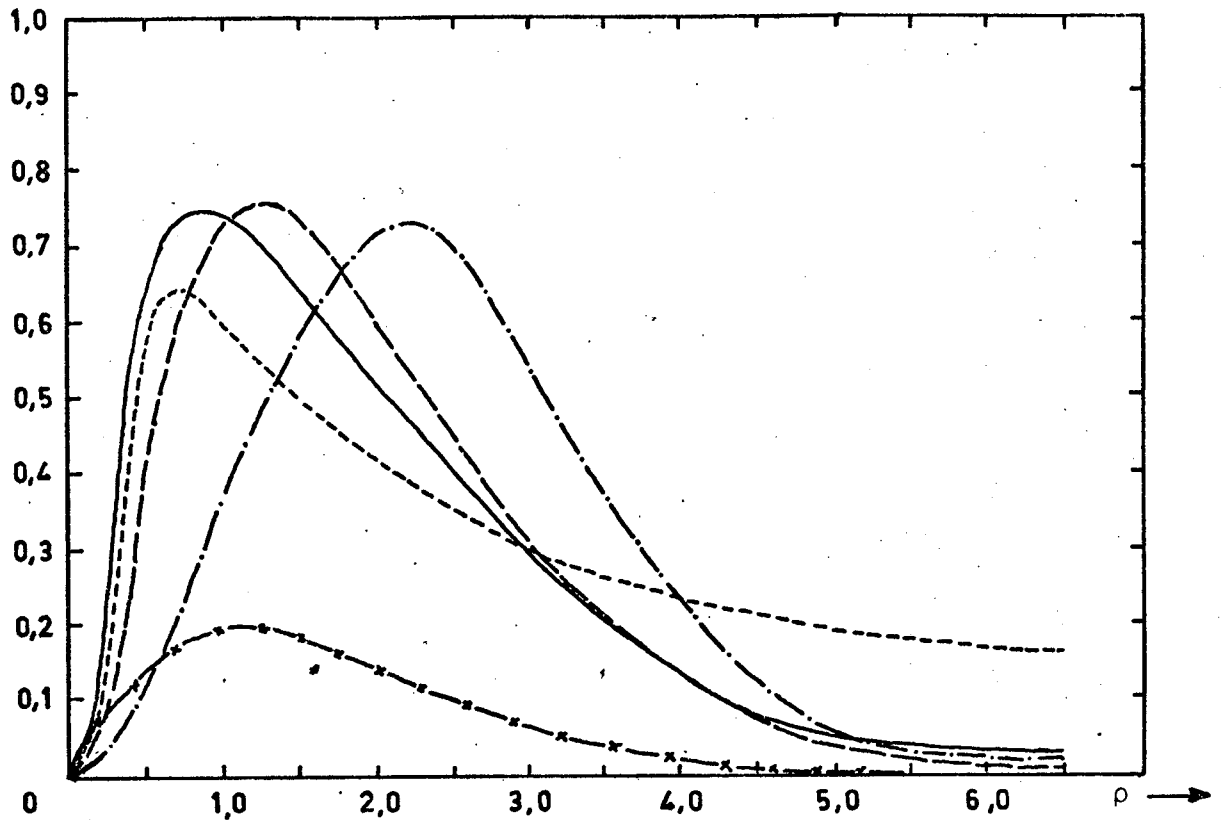
$$\Delta_{ij} = \int \phi_i^* \phi_j \, d\tau = \delta_{ij} ,$$

e, assim, os valores da energia são obtidos pela diagonalização da matriz  $H$  na base  $\phi$ :

$$\begin{vmatrix} E_{1t} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & E_{2t} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & E_{Nt} \end{vmatrix} = T^{-1} H T , \quad (\text{I.27})$$

onde  $T$  é a matriz que diagonaliza  $H$  [5].

FIG. I.1 - FORMA DAS FUNÇÕES VARIACIONAIS PARA O ÁTOMO DE HI  
DROGÊNIO NO ESTADO FUNDAMENTAL.

$u(\rho)$ 


—	$u_1 = 2\rho e^{-\rho}$
—x—x—x—	$u_2 = \frac{4}{\sqrt{27}\pi} \rho e^{-\frac{8}{9\pi}\rho^2}$
-----	$u_3 = \frac{9\sqrt{2}}{4} \rho^2 e^{-\frac{3}{2}\rho}$
-----	$u_4 = \frac{\rho}{[\frac{\pi}{4}]^2 + \rho^2}$
-----	$u_5 = \frac{512}{49\pi\sqrt{21}\pi} \rho^2 e^{-\lambda\rho^2}$

TAB. I.1 - CÁLCULO VARIACIONAL DE PROPRIEDADES DO ESTADO FUNDA  
MENTAL DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO.

	$u_1$	$u_2$	$u_3$	$u_4$	$u_5$
$u(\lambda, \rho)$	$\rho e^{-\lambda \rho}$	$\rho e^{-\lambda \rho^2}$	$\rho^2 e^{-\lambda \rho}$	$\frac{\rho}{\lambda^2 + \rho^2}$	$\rho^2 e^{-\lambda \rho^2}$
$N^2$	$\frac{1}{4\lambda^3}$	$\frac{\sqrt{\pi}}{4(2\lambda)^{3/2}}$	$\frac{3}{4\lambda^5}$	$\frac{\pi}{4\lambda}$	$\frac{3\sqrt{\pi}}{8(2\lambda)^{5/2}}$
$\lambda_{\min}$	1	$\frac{8}{9\pi}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{\pi}{4}$	$\frac{32}{49\pi}$
$E_t$	$-E_H$	$-0,85 E_H$	$-0,75 E_H$	$-0,81 E_H$	$-0,06 E_H$
$\frac{E_t - \epsilon_0}{\epsilon_1 - \epsilon_0}$	0	0,20	0,33	0,25	1,25
$\langle r \rangle_t$	$1,5a_0$	$0,80a_0$	$1,66a_0$	$\infty$	$3,62a_0$
$\frac{E\lambda}{E_H}$	$\lambda^2 - 2\lambda$	$3\lambda - 4\sqrt{\frac{2\lambda}{\pi}}$	$\frac{\lambda^2}{3} - \lambda$	$\frac{\pi - 8\lambda}{2\pi\lambda^2}$	$\frac{7\lambda}{3} - \frac{8}{3}\sqrt{\frac{2\lambda}{\pi}}$

$$*N^2 = \int \Psi^* \Psi d\tau$$

$$\langle r \rangle_t = \frac{\int \Psi^* r \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau}, \quad \lambda = \lambda_{\min}$$

$\epsilon_0$  e  $\epsilon_1$  → energias do estado fundamental e do primeiro estado excitado, respectivamente.

$u(1, \rho) = \rho e^{-\rho}$  → função de onda exata para o estado fundamen - tal.

## II - POTENCIAL TIPO POÇO QUADRADO

### 1 - INTRODUÇÃO

A interação entre dois bósons idênticos através de um potencial central do tipo poço quadrado com caroço é estudada, utilizando-se como função tentativa dois tipos de funções: a primeira é a expansão em termos de uma base não ortonormal e a segunda uma expansão em termos de uma base ortonormal.

A solução de problemas que envolvam partículas que interagem através de um potencial deste tipo pode ser encontrada resolvendo-se a equação de Schrödinger:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + V(r) \right] \Psi(r) = E \Psi(r) , \quad (\text{II.1})$$

onde:

$$V(r) = \begin{cases} \infty , & r \leq \sigma \\ -V_0 , & \sigma < r < \sigma + r_0 \\ 0 , & r \geq \sigma + r_0 \end{cases} , \quad (\text{II.2})$$

sendo  $r$  a distância entre as duas partículas,  $r_0$  o alcance do potencial e  $\sigma$  seu caroço rígido (ver figura II.1);  $\mu$  é a massa reduzida do sistema e  $\nabla_r^2$  é o laplaciano em  $r$ . A equação (II.1) pode ser resolvida analiticamente<sup>[4]</sup>, dando como resultado para a energia a equação transcendental:

$$\sqrt{\frac{8 m r_0^2}{\hbar^2} E} = - \sqrt{\frac{8 m r_0^2}{\hbar^2} |E - V_0|} \cotg \sqrt{\frac{8 m r_0^2}{\hbar^2} |E - V_0|} , \quad (\text{II.3})$$

que pode ser resolvida graficamente.

A utilização do método variacional linear na resolu-



ção deste problema, que tem solução analítica conhecida, tem como objetivo testar a convergência para o valor mínimo da energia variacional quando obtida através de diferentes funções tentativas. Particularmente, testa-se a maior conveniência na utilização de uma função de onda tentativa, que é uma expansão em termos de um conjunto completo de funções ortonormais, quando comparada com uma função de onda tentativa que é uma expansão em termos de um conjunto completo de funções não ortonormais.

## 2 - FUNÇÕES UTILIZADAS

Para o hamiltoniano do tipo

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + V(r) , \quad (\text{II.4})$$

com  $V(r)$  sendo aquele definido em (II.2), procura-se uma base composta de funções que reflitam a simetria do problema, isto é, uma função de  $r$  tal que:

$$\psi_n(\sigma) = 0 \quad \text{e} \quad \psi_n(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0.$$

Fazendo-se as mudanças de variáveis:

$$r' = \frac{r - \sigma}{\lambda r_0} , \quad \psi = \frac{\phi(r')}{r} , \quad (\text{II.5})$$

sendo  $\lambda$  um parâmetro variacional, o potencial em (II.2) toma a forma:

$$V(r') = \begin{cases} \infty , & r' = 0 \\ -V_0 , & 0 < r' < \frac{1}{\lambda} \\ 0 , & r' \geq \frac{1}{\lambda} \end{cases} \quad (\text{II.6})$$

e a equação de Schrödinger podendo então ser reescrita como [1]:

$$\left[ -\frac{2}{\pi^2 S} \frac{1}{\lambda^2} \frac{\partial^2}{\partial r'^2} - \frac{V}{V_0} \right] \phi(r') = \frac{E}{V_0} \phi(r'), \quad (\text{II.7})$$

com  $S = \frac{8\mu V_0 r_0^2}{\pi^2 \hbar^2}$ , tendo solução dada por:

$$\beta' = -\beta \cotg \beta, \quad (\text{II.8})$$

$$\text{sendo } \beta' = \sqrt{\pi^2 S \frac{E}{V_0}} \quad \text{e} \quad \beta = \sqrt{\pi^2 S \left| \frac{E}{V_0} - 1 \right|}.$$

A equação matricial a ser resolvida é (eq. I.23):

$$B_{nm} = \frac{H_{nm}}{V_0} - E \frac{N_{nm}}{V_0} = 0, \quad (\text{II.9})$$

$$\text{onde: } H_{nm} = \int \psi_n^*(r) H \psi_m(r) d\tau$$

e

$$N_{nm} = \int \psi_n^*(r) \psi_m(r) d\tau,$$

sendo que as funções  $\psi_m(r)$  são as funções que compõem o conjunto base escolhido,  $V_0$  é a intensidade do potencial,  $H$  o hamiltoniano do problema e  $E$  a energia a ser determinada.

A primeira função de onda tentativa é uma expansão em termos de uma base composta de funções não ortonormais. Após algumas análises de convergência para o valor mínimo da energia, utilizando-se várias funções tentativa tais como:

$$\psi_1(r) = \sum_{n=1}^N a_n \frac{r'^{2n-1}}{r} e^{-r'^2},$$

$$\psi_2(r) = \sum_{n=1}^N a_n \frac{r'^{2n-1}}{\lambda r} e^{-r'^2},$$

$$\Psi_3(r) = \sum_{n=0}^N a_n \frac{r_1^{2n+1}}{r} e^{-\lambda r_1^2}, \quad (\text{II.10})$$

$$\Psi_4(r) = \sum_{n=1}^N a_n \frac{r_1^{2n}}{r} e^{-\lambda r_1^2},$$

$$\Psi_5(r) = \sum_{n=1}^N a_n \frac{r_1^n}{r} e^{-\lambda r_1^2},$$

onde  $r' = \frac{r - \sigma}{\lambda r_0}$  e  $r_1 = \frac{r - \sigma}{r_0}$ , escolheu-se a função  $\Psi_1(r)$  como função variação deste problema:

$$\Psi(r) = \Psi_1(r) = \sum_n a_n \psi_n = \sum_{n=1}^N a_n \frac{r'^{2n-1}}{r} e^{-r'^2}. \quad (\text{II.11})$$

Para a função variação dada acima, os elementos matriciais são:

$$\begin{aligned} \langle n|B|m \rangle = & - \frac{2}{\lambda^2 \pi^2 S} \sqrt{\frac{\pi}{2}} 4^{1-(n+m)} \{ [2(n+m) - 1]!! - \\ & - 2(4m-1) [2(n+m)-3]!! + 4(2m-1)(2m-2) [2(n+m) - 5]!! \} - \\ & - \left\{ - \frac{e^{-2/\lambda^2}}{4} \sum_{p=1}^{n+m-1} \frac{[2(n+m) - 3]!!}{\lambda^{2(n+m)-2p-1} 4^{p-1} [2(n+m) - 2p-1]!!} \right. + \\ & + \left. \frac{[2(n+m) - 3]!!}{2 \times 4^{n+m-1}} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{2}}{\lambda}\right) \right\} - \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{[2(n+m) - 3]!!!}{2 \times 4^{n+m-1}} \frac{E}{V_0}, \end{aligned} \quad (\text{II.12})$$

onde  $\operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{2}}{\lambda}\right)$  é a função erro de  $\frac{\sqrt{2}}{\lambda}$  (ver apêndices D e B).

A segunda função de onda escolhida foi uma expansão em termos de uma base formada por um conjunto completo de funções ortonormais; no caso, escolheu-se como base as funções de onda que são autofunções do oscilador harmônico simples tridi -

mensional isotrópico, com momentum angular zero. Assim sendo,  $\Psi_n(r)$  tem a forma:

$$\Psi_n(r) = \sum_{n=0}^N a_n N_{2n+1} \frac{e^{-\frac{r'^2}{2}}}{r} H_{2n+1}(r') \quad , \quad (\text{II.13})$$

$$\text{onde: } N_{2n+1} = \left[ \frac{1}{\sqrt{\pi} 2^{2n+1} (2n+1)!} \right]^{1/2} \quad ,$$

$H_{2n+1}(r')$  é o polinômio de Hermite de ordem  $(2n+1)$  e  $r'$  é o definido em (II.5)

Deve-se atentar para o fato de que o parâmetro variacional,  $\lambda$ , encontra-se também dentro dos  $H_{2n+1}(r')$ .

Os elementos que compõem a matriz a ser diagonalizada têm a forma (para a função variação dada em (II.13)):

$$\begin{aligned} \langle n|B|m \rangle &= \frac{2}{\lambda^2 \pi^2 S} \left[ (2n+1) \delta_{n,m} - \sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{n,m-2} \right. \\ &- \left. \sqrt{n(n-1)} \delta_{n,m+2} \right] - A_n A_m \int_0^{1/\lambda} H_n(r') H_m(r') e^{-r'^2} dr' \\ &- \frac{E}{V_0} \delta_{n,m} \quad , \quad (\text{II.14}) \end{aligned}$$

$$\text{com } A_n = \left[ \frac{1}{\sqrt{\pi} 2^{n-1} n!} \right]^{1/2} \quad (\text{ver apêndice D}).$$

A integral contida em (II-12),

$$\int_0^{1/\lambda} H_n(r') H_m(r') e^{-r'^2} dr' \quad , \quad (\text{II.15})$$

com  $n$  e  $m$  ímpares, tem como solução a expressão (ver apêndice D):

$$\left\{ - 2^m m! H_{n-m-1}(1/\lambda) e^{-1/\lambda^2} - \left( \sum_{i=1}^m H_{m-i+1}(1/\lambda) H_{n-i}(1/\lambda) e^{-1/\lambda^2} \right) \right. \\ \left. \left( 2^{i-1} \frac{m!}{(m-i+1)!} \right) \right\}, \text{ para } n > m \quad (\text{II.15a})$$

e

$$\left\{ 2^n n! \sqrt{\frac{\pi}{2}} \operatorname{erf}(1/\lambda) - \left( \sum_{i=1}^n H_{n-i+1}(1/\lambda) H_{n-i}(1/\lambda) e^{-1/\lambda^2} \right) \right. \\ \left. \left( 2^{i-1} \frac{n!}{(n-i+1)!} \right) \right\}, \text{ para } n = m. \quad (\text{II.15b})$$

Para o cálculo do parâmetro variacional procedeu-se da seguinte maneira: através da eq. (II.9) chegou-se à expressão de B (matriz a ser diagonalizada) para uma base composta de uma única função; de posse desta expressão, minimizou-se esta em relação ao parâmetro variacional  $\lambda$ . O processo de minimização foi completado com a utilização do método iterativo de Newton para solução de um conjunto de N equações não lineares [6].

### 3 - RESULTADOS OBTIDOS

Os resultados encontrados pela aplicação do método variacional linear, com as funções de onda explicitadas em (II.11) e (II.13), são apresentados nas tabelas (II.1) e (II.2), respectivamente.

A ocorrência de dependência linear no conjunto base é entendida como sendo devida à superposição das funções de onda que o compõem. No caso em que o conjunto base é composto de funções não ortonormais, a ocorrência de dependência linear já

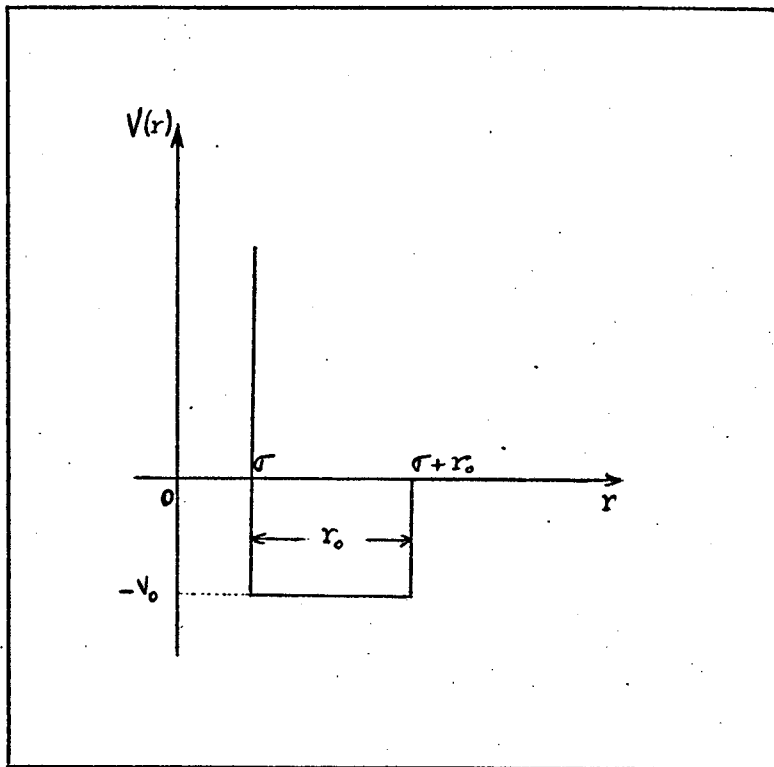
com 7 funções impede a obtenção de valores mais precisos (ver tabela (II.1)); no caso em que a base é composta por funções ortonormais (ver tabela (II.2)), não ocorre dependência linear no conjunto base, o que faz com que os resultados obtidos estejam bem mais próximos do valor exato.

Outro aspecto que evidencia o fato de a base ortonormal apresentar melhores resultados é o de convergência mais lenta para zero dos coeficientes  $a_n$ , que aparecem nas equações (II.11) e (II.13), à medida que  $n$  aumenta. Os coeficientes  $a_n$  estão listados na tabela (II.3) para os primeiros valores de  $n$ .

Valores de  $\frac{E}{V_0}$  foram calculados para diferentes valores de  $S$ , quais sejam:

- $S = 1 \rightarrow$  sistema não ligado
- $S = 2 \rightarrow$  sistema fracamente ligado
- $S = 4 \rightarrow$  sistema fracamente ligado.

FIG. II.1 - POTENCIAL TIPO POÇO QUADRADO COM CAROÇO RÍGIDO.





TAB. II.1 - ENERGIA DO ESTADO FUNDAMENTAL DE UM SISTEMA DE 2 BÓSONS QUE INTERAGEM ATRAVÉS DE UM POTENCIAL TIPO POÇO QUADRADO COM REPULSÃO, USANDO FUNÇÕES NÃO ORTOGONAIS NO CONJUNTO BASE.

(  $\lambda = 1,1464$ ) VALORES EXATOS:

$$E/V_0 = -0,18105^{[7]}, \text{ para } S = 2$$

$$E/V_0 = -0,4575, \text{ para } S = 4$$

N*	S**	E/V <sub>0</sub> ***
5	2	-0,17554
6	2	-0,17882
7	2	DEP. LINEAR
5	4	-0,45139
6	4	-0,45310
5	1	0,09091
6	1	0,07122

\*N = nº de funções no conjunto base

$$**S = \frac{8m V_0 r_0^2}{\pi^2 \hbar^2}$$

\*\*\*E/V<sub>0</sub> = energia do estado fundamental

TAB. II.2 - ENERGIA DO ESTADO FUNDAMENTAL DE UM SISTEMA DE 2 BÓSONS QUE INTERAGEM ATRAVÉS DE UM POTENCIAL TIPO POÇO QUADRADO COM REPULSÃO, USANDO FUNÇÕES ORTONORMAIS NO CONJUNTO BASE.

( $\lambda = 0,81072$ ) VALORES EXATOS:

$$E/V_0 = -0,18105^{[7]}, \text{ para } S = 2$$

$$E/V_0 = -0,4575, \text{ para } S = 4$$

N*	S**	E/V <sub>0</sub> ***
5	2	-0,17554
6	2	-0,17883
7	2	-0,17894
10	2	-0,18010
15	2	-0,18060
5	4	-0,45142
6	4	-0,45313
5	1	0,09089
6	1	0,07125

\*N = nº de funções no conjunto base.

$$**S = \frac{8m \cdot V_0 \cdot r_0^2}{\pi^2 \hbar^2}$$

\*\*\*E/V<sub>0</sub> = energia do estado fundamental.

TAB. II.3 - COEFICIENTES DAS FUNÇÕES QUE COMPÕEM A FUNÇÃO DE ONDA  $\Psi$  DO ESTADO FUNDAMENTAL DO SISTEMA DE 2 BÓSONS INTERAGINDO ATRAVÉS DO POTENCIAL TIPO POÇO QUADRADO COM CAROÇO RÍGIDO, PARA 6 E 7 FUNÇÕES NO CONJUNTO BASE ( $a_n$  E  $b_n$ , RESPECTIVAMENTE);  $a_n^a$  e  $b_n^a$  RELACIONAM-SE COM A BASE ORTONORMAL E  $a_n^b$  e  $b_n^b$  DIZEM RESPEITO À BASE NÃO ORTONORMAL.

n	$a_n^a(\alpha = 0,81072)$	$a_n^b(\alpha = 1,1465)$	n	$b_n^a(\alpha = 0,81072)$	$b_n^b(\alpha = 1,1465)$
1	0,98040	-0,86316	1	0,98120	-0,97620
2	0,08657	-0,10247	2	0,08546	0,12105
3	0,15608	0,37441	3	0,15432	-0,02343
4	0,06849	-0,27218	4	0,06600	0,00781
5	0,03060	0,05990	5	0,02692	-0,03124
6	0,03641	0,00520	6	0,03170	0,00781
			7	-0,00635	-0,00070

### III - POTENCIAL TIPO BARBANIS

#### 1 - INTRODUÇÃO

O potencial tipo oscilador harmônico com perturbação do tipo  $\alpha x y^2$  (hamiltoniano de Barbanis) é de grande interesse no campo do estudo molecular, visto que uma molécula pode ser tratada como um conjunto de osciladores acoplados, e este potencial leva em conta o caráter anarmônico apresentado por estes osciladores.

A interação entre dois bósons idênticos através deste tipo de potencial é estudada. O hamiltoniano que representa tal sistema, no caso bidimensional, pode ser dividido em duas partes:

$$H = H_0 + H_p \quad , \quad (\text{III.1})$$

onde

$$H_0 = \frac{p_x^2}{2\mu} + \frac{p_y^2}{2\mu} + k_x \frac{x^2}{2} + k_y \frac{y^2}{2} \quad (\text{III.2})$$

e

$$H_p = - \alpha x y^2 \quad . \quad (\text{III.3})$$

A equação (III.2) refere-se a um sistema que apresenta anisotropia em sua harmonicidade; o caso em que  $k_x = k_y = k$  é também estudado, sendo tal sistema, portanto, caracterizado por uma harmonicidade isotrópica.

A energia do estado fundamental destes dois sistemas, com momentum angular nulo, é calculada e, quando possível, comparada com valores da literatura.

## 2 - FUNÇÕES UTILIZADAS

O hamiltoniano isotrópico bidimensional de Barbanis é dado pela expressão:

$$H = \frac{p_x^2}{2\mu} + \frac{p_y^2}{2\mu} + \frac{k}{2} (x^2 + y^2) - \alpha x y^2, \quad (\text{III.4})$$

onde o termo  $\alpha x y^2$  expressa o acoplamento entre os osciladores e  $\alpha$  é a constante de acoplamento. A variável  $\mu$  é a massa reduzida do sistema.

A função variação utilizada para o cálculo da energia do estado fundamental do sistema é uma expansão linear em termos de uma base que forma um conjunto completo de funções ortonormais, visto já se ter comprovada (ver seção II.3) que este tipo de base fornece resultados mais precisos; as funções componentes desta base, no caso do hamiltoniano contido na eq.(III. 4), são as funções do oscilador harmônico bidimensional isotrópico:

$$\Psi(x,y) = \sum_{n,m} a_{nm} N_n N_m e^{-\beta^2 \frac{x^2+y^2}{2}} H_n(\beta x) H_m(\beta y), \quad (\text{III.5})$$

onde  $H_n$  é o polinômio de Hermite de ordem  $n$  e  $\beta = \left[ \frac{\mu k}{\hbar^2} \right]^{1/4}$ .

A expressão para os elementos que compõem a matriz a ser diagonalizada (B):

$$B_{qp,mn} = H_{qp,mn} - E \delta_{q,m} \delta_{pn}, \quad (\text{III.6})$$

é da forma [2]:



$$\begin{aligned}
\langle qp|B|mn\rangle &= \hbar\omega(m+n+1)\delta_{q,m}\delta_{p,n} - \\
&- \alpha \left[ \frac{\hbar}{2\mu\omega} \right]^{3/2} \{ [\sqrt{m(m-1)}\delta_{q,m-2} + \sqrt{(m+1)(m+2)}\delta_{q,m+2} + \\
&+ (2m+1)\delta_{q,m}] \times [\sqrt{n}\delta_{p,n-1} + \sqrt{n-1}\delta_{p,n+1}] \} - E\delta_{q,m}\delta_{p,n} , \\
\end{aligned} \tag{III.7}$$

onde  $\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ .

No caso que se refere ao hamiltoniano não isotrópico bidimensional de Barbanis:

$$H = \frac{p_x^2}{2\mu} + \frac{p_y^2}{2\mu} + k_x \frac{x^2}{2} + k_y \frac{y^2}{2} - \alpha xy^2 , \tag{III.8}$$

a expressão para os elementos matriciais torna-se (ver apêndice C):

$$\begin{aligned}
\langle qp|B|mn\rangle &= \hbar \left[ \left(n+\frac{1}{2}\right)\omega_x + \left(m+\frac{1}{2}\right)\omega_y \right] \delta_{q,m}\delta_{p,n} - \\
&- \frac{\alpha}{4} \left\{ \frac{2m+1}{\omega_y} \sqrt{\frac{2n}{\omega_x}} \delta_{q,m}\delta_{p,n-1} + \frac{2m+1}{\omega_y} \sqrt{\frac{2(n+1)}{\omega_x}} \delta_{q,m} \right. \\
&\delta_{p,n+1} + \frac{\sqrt{m(m-1)}}{\omega_y} \sqrt{\frac{2n}{\omega_x}} \delta_{q,m-2}\delta_{p,n-1} + \\
&+ \frac{\sqrt{m(m-1)}}{\omega_y} \sqrt{\frac{2(n+1)}{\omega_x}} \delta_{q,m-2}\delta_{p,n+1} + \frac{\sqrt{(m+1)(m+2)}}{\omega_y} \\
&\left. \sqrt{\frac{2n}{\omega_x}} \delta_{q,m+2}\delta_{p,n-1} + \frac{\sqrt{(m+1)(m+2)}}{\omega_y} \sqrt{\frac{2(n+1)}{\omega_x}} \delta_{q,m+2}\delta_{p,n+1} \right\} \\
&- E\delta_{q,m}\delta_{p,n} , \\
\end{aligned} \tag{III.9}$$

com  $\omega_x = \sqrt{\frac{k_x}{\mu}}$  e  $\omega_y = \sqrt{\frac{k_y}{\mu}}$ .

A função variação utilizada, neste caso, é dada pela expressão:

$$\Psi(x,y) = \sum_{n,m} a_{nm} N_n N_m e^{-\beta_x \frac{x^2}{2} - \beta_y \frac{y^2}{2}} H_n(\beta_x x) H_m(\beta_y y), \quad (\text{III.10})$$

sendo  $\beta_x = \left[ \frac{\mu k_x}{\hbar^2} \right]^{1/4}$  e  $\beta_y = \left[ \frac{\mu k_y}{\hbar^2} \right]^{1/4}$ .

### 3 - RESULTADOS OBTIDOS

Os resultados encontrados para a energia do estado fundamental dos sistemas de Barbanis expressos pelos hamiltonianos contidos nas equações (III.4) e (III.8) são apresentados nas tabelas (III.1) e (III.2), respectivamente.

Os valores que compõem a tabela (III.1) foram obtidos escolhendo-se:

$$\mu = \hbar = 1, \quad \alpha = 0,1 \quad \text{e} \quad \omega = 1 \quad ;$$

aqueles contidos na tabela (III.2) foram obtidos escolhendo-se<sup>[8]</sup>:

$$\mu = \hbar = 1, \quad \alpha = 0,08, \quad \omega_x = 1,264911 \quad \text{e} \quad \omega_y = 0,948683.$$

Os valores encontrados para  $E_t$ , a energia do estado fundamental, concordam com os valores apresentados na literatura<sup>[8]</sup>; valores para estados excitados do sistema de Barbanis são, também, calculados e comparados com a literatura existente (ver tabelas (III.4) e (III.5)).

O cálculo de  $E_t$  para outros valores de  $\alpha$  são apresentados na tabela (III.1).

A tabela (III.1) mostra a alteração pouco expressiva nos valores de  $E_t$  quando se muda o valor de  $\alpha$  para  $(-\alpha)$ , para valores pequenos da constante de acoplamento, o que já não ocorre quando estes valores aumentam. Pequenos valores de  $\alpha$  correspondem a uma perturbação pequena no hamiltoniano, o que nos leva a pensar em tratar este problema pela teoria de perturbação [4, 9]. Supondo que a correção em 1ª ordem na função de onda é do tipo:

$$\psi^{(1)} = F \psi_0, \quad (\text{III.11})$$

onde  $\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{2} - \frac{y^2}{2}}$  e  $F = F(x, y)$ , e sabendo-se que a função em (III.11) deve satisfazer a equação [4]:

$$(H_0 - \epsilon_0) \psi^{(1)} = (E^{(1)} - H_p) \psi_0, \quad (\text{III.12})$$

com  $\epsilon_0 =$  energia do estado fundamental do oscilador harmônico não perturbado,

$H_p$  é o definido na equação (III.3) e

$E^{(1)}$  é a correção em 1ª ordem na energia do sistema de Barbanis,

chega-se à seguinte expressão para  $E^{(1)}$ :

$$E^{(1)} = \int \psi_0 H_p \psi_0 dx dy. \quad (\text{III.13})$$

As expressões para a correção em 2ª e 3ª ordem para a energia são obtidas de maneira análoga à obtenção da equação (III.13), e são expressas por:

$$E^{(2)} = \int \psi_0 (H_p - E^{(1)}) \psi_0 F dx dy \quad (\text{III.14})$$

$$E^{(3)} = \int F \psi_0 (H_p - E^{(1)}) \psi_0 F dx dy . \quad (\text{III.15})$$

Substituindo (III.11) em (III.12) chega-se à equação:

$$\nabla \cdot (\psi_0^2 \nabla F) = 2 \psi_0 (H_p - E^{(1)}) \psi_0 ; \quad (\text{III.16})$$

supondo-se que  $F(x,y)$  tem a forma:

$$F(x,y) = a x y^2 + b x ,$$

onde  $a$  e  $b$  são constantes, e substituindo em (III-16) obtém-se os seguintes resultados:

$$a = b = -\frac{\alpha}{3} ,$$

$$E^{(1)} = 0 ,$$

$$E^{(2)} = -\frac{5}{24} \alpha^2 \quad e$$

$$E^{(3)} = 0 ,$$

os quais explicam o fato de o sinal de  $\alpha$ , para valores pequenos da constante de acoplamento, não alterar os valores calculados de  $E_t$  (a energia do estado fundamental): as correções de ordem ímpar à energia do estado fundamental são nulas, enquanto que a correção de 2ª ordem depende de  $\alpha^2$ , que, evidentemente, independe do sinal de  $\alpha$ .

A tabela (III.3) apresenta os valores dos coeficientes  $a_{nm}$  contidos nas equações (III.5) e (III.10).

TAB. III.1 - ENERGIA DO ESTADO FUNDAMENTAL DO SISTEMA DE BAR  
BANIS ISOTRÓPICO ( $\hbar = \mu = \omega = 1$ ) ( $k_x = k_y = k$ ).

$N^*$	$\alpha^{**}$	$E_t^{***}$
6	0,100	0,99791
18	0,100	0,99788
30	0,100	0,99785
40	0,100	0,99784
49	0,100	0,99780
40	-0,100	0,99789
40	0,200	-1,02846
40	-0,200	0,99122
40	0,300	-5,51296
40	-0,300	0,97883
40	0,400	-10,09628
40	-0,400	0,95666
40	0,500	-14,71291
40	-0,500	0,14611
40	1,000	-37,93200
40	-1,000	-8,80921

\*N = nº de funções no conjunto base.

\*\*  $\alpha$  = constante de acoplamento.

\*\*\* $E_t$  = energia variacional do estado fundamental.

TAB. III.2 - ENERGIA DO ESTADO FUNDAMENTAL DO SISTEMA DE BAR

BANIS ANISOTRÓPICO ( $\hbar = \mu = 1$ ;  $\omega_x = 1,264911$ ;

$\omega_y = 0,948683$ ) ( $k_x \neq k_y$ ).

VALOR ENCONTRADO NA LITERATURA<sup>[8]</sup>:  $E_t = 1,1058$ .

$N^*$	$\alpha^{**}$	$E_t^{***}$
6	0,080	1,10624
18	0,080	1,10579
30	0,080	1,10578
42	0,080	1,10578
49	0,080	1,10578

\*N = nº de funções no conjunto base.

\*\* $\alpha$  = constante de acoplamento.

\*\*\* $E_t$  = energia variacional do estado fundamental.



TAB. III.3 - COEFICIENTES DAS FUNÇÕES QUE COMPÕEM AS FUNÇÕES DE ONDA  $\Psi$  DO ESTADO FUNDAMENTAL DOS SISTEMAS DE BARBANIS ISOTRÓPICO ( $a_n^a$ ) E ANISOTRÓPICO ( $a_n^b$ ), PARA 9 FUNÇÕES NO CONJUNTO BASE.

n	$a_n^a (\alpha = 0,1)$	$a_n^b (\alpha = 0,08)$
1	0,99922	0,99971
2	0,03557	0,02102
3	0,00155	0,00058
4	0,00141	0,00075
5	0,00077	0,00035
6	0,00048	0,00021
7	0,00250	0,00129
8	0,01703	0,01198
9	0,00169	0,00076

TAB. III.4 - ENERGIA DO ESTADO FUNDAMENTAL E DOS ESTADOS EX-  
CITADOS DO SISTEMA DE BARBANIS ISOTRÓPICO, COM  
49 FUNÇÕES NA BASE ( $\alpha = 0,100$ ;  $\hbar = \mu = \omega = 1$ ).

nº	$E_t^a$	nº	$E_t^a$ (continuação)
01	0,99780	26	7,05919
02	1,65347	27	7,28164
03	1,99540	28	7,29834
04	1,99870	29	7,63739
05	2,84794	30	7,87801
06	2,98614	31	7,99940
07	3,05588	32	8,09071
08	3,71791	33	8,32327
09	3,96022	34	8,40376
10	4,06725	35	8,74763
11	4,09378	36	8,97425
12	4,69417	37	9,12815
13	4,94951	38	9,40634
14	5,04248	39	9,47002
15	5,11782	40	9,85635
16	5,20012	41	10,22151
17	5,69046	42	10,28489
18	5,93870	43	10,57375
19	6,00053	44	10,98438
20	6,13869	45	11,38840
21	6,21136	46	11,56489
22	6,46989	47	12,05290
23	6,73881	48	12,82968
24	6,93359	49	14,01943
25	7,01020		

TAB. III.5 - ENERGIA DO ESTADO FUNDAMENTAL E DOS ESTADOS EXCITADOS DO SISTEMA DE BARBANIS ANISOTRÓPICO, COM 49 FUNÇÕES NA BASE ( $\alpha = 0,080$ ;  $\hbar = \mu = 1$ ;  $\omega_x = 1,264911$ ;  $\omega_y = 0,948683$ ).

nº	$E_t^b$	nº	$E_t^b$ (continuação)
01	1,10578	26	7,90246
02	2,03496	27	8,09763
03	2,36715	28	8,39587
04	2,84546	29	8,40068
05	3,28561	30	8,70612
06	3,44380	31	8,74985
07	3,63367	32	9,07347
08	4,16749	33	9,25329
09	4,27493	34	9,37859
10	4,57727	35	9,69586
11	4,89987	36	9,73691
12	5,13373	37	10,08586
13	5,24831	38	10,36376
14	5,51634	39	10,59360
15	5,85186	40	10,71060
16	6,08337	41	11,10558
17	6,16664	42	11,36604
18	6,42465	43	11,74238
19	6,51537	44	11,92832
20	6,80617	45	12,39618
21	7,04725	46	12,79643
22	7,12614	47	13,14123
23	7,42146	48	13,89637
24	7,43337	49	14,94184
25	7,75377		

### CONCLUSÃO

A função de onda que representa o estado quântico de um sistema de 2 bósons que interagem através de um potencial tipo poço quadrado com caroço rígido pode ser aproximada por uma função variação que é uma combinação linear de funções conhecidas. Tais funções formam um conjunto completo ortonormal ou não ortonormal. Os resultados obtidos para a energia do estado fundamental ( $E/V_0$ ) de tal sistema no caso em que a base é não ortonormal apresentam um erro mínimo de 1,2% em relação ao valor exato, visto que nesta base ocorre dependência linear já com 7 funções. Quando a base é ortonormal, e composta de 15 funções, o valor obtido para  $E/V_0$  tem um erro da ordem de 0,3%; tal erro será menor quanto maior for o número de funções na base.

A dependência linear no conjunto base pode ser entendida analisando-se a tabela (II.3), onde são apresentados os coeficientes  $a_n$  e  $b_n$ , correspondentes a uma base de 6 e 7 funções, respectivamente: pode-se ver que os  $a_n^a$  e  $b_n^a$  (coeficientes da base ortonormal) caem mais lentamente a zero do que os  $a_n^b$  e  $b_n^b$  (coeficientes da base não ortonormal). Nos coeficientes que correspondem à base formada por 7 funções vê-se que a contribuição de  $b_7^b$  para a função de onda  $\Psi$  é praticamente nula ( $|b_7^b|^2 \cong 10^{-7}$ ), enquanto que a contribuição de  $b_7^a$ , embora pequena ( $|b_7^a|^2 \cong 10^{-5}$ ), ainda é maior que a do coeficiente  $b_7^b$ ; tal comportamento da base não ortonormal (coeficientes  $b_n^b$ ) leva à conclusão de que esta sétima função praticamente não contribui para uma maior precisão no cálculo da energia do estado fundamental do sistema considerado, e sua inclusão no conjunto base gera uma superposição das funções que o compõem, o que leva à dependência linear na base

( $\phi_7$  pode ser escrita como uma combinação linear de  $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_6$ ).

Com base neste teste, o problema de um sistema de 2 bósons que interagem através dos potenciais de Barbanis, caso isotrópico ( $k_x = k_y = k$ ) e caso anisotrópico ( $k_x \neq k_y$ ), é estudado utilizando, como função variação, uma combinação linear de funções ortonormais (as funções de onda radiais do oscilador harmônico simples). Os resultados obtidos, através do cálculo variacional, concordam com os resultados encontrados na literatura. Para o estudo do sistema de Barbanis isotrópico fica evidenciado que, para valores de  $\alpha$ , a constante de acoplamento, variando entre  $-0,400$  e  $0,100$ , o resultado obtido para a energia do estado fundamental ( $E_t$ ) é pouco afetado (menos de 5%). Acima de  $0,100$  o valor de  $E_t$  começa a depender bastante do valor da constante de acoplamento. À medida que  $\alpha$  cresce, a convergência de  $E_t$  é mais lenta, havendo necessidade de um maior número de funções na base.

No que diz respeito ao sinal de  $\alpha$ , este não altera significativamente (menos de 5%) o valor de  $E_t$  para  $\alpha$  variando entre  $-0,200$  e  $0,200$ . Tal comportamento pode ser explicado considerando-se, para valores da constante de acoplamento variando entre  $-0,200$  e  $0,200$  aproximadamente, o termo de  $\alpha xy^2$  como uma pequena perturbação ao potencial não perturbado ( $\frac{k}{2}(x^2+y^2)$ ); tal enfoque leva ao cálculo das correções em 1ª, 2ª e 3ª ordem ( $E^{(1)}$ ,  $E^{(2)}$  e  $E^{(3)}$  respectivamente), pela teoria de perturbação, para o valor de  $E_t$ , que dá como resultados:  $E^{(1)} = 0$ ,  $E^{(2)} = -\frac{5}{24} \alpha^2$  e  $E^{(3)} = 0$ . A correção em 2ª ordem depende de  $\alpha^2$ , o que explica a invariância de  $E_t$  com o sinal de  $\alpha$ . Para valores da constante de acoplamento maiores que  $0,200$ , o termo  $\alpha xy^2$  não pode mais ser considerado uma pequena perturbação ao potencial não pertur-



bado, não sendo mais possível a aplicação do cálculo das correções para o valor de  $E_t$  pela teoria de perturbação, o que explica a variação no valor de  $E_t$  quando se muda de  $\alpha$  para  $-\alpha$ .

Valores das energias para estados excitados dos sistemas de Barbanis são apresentados e, quando possível, comparados com valores existentes na literatura, estando em concordância com estes [2]. Valores encontrados por outros autores [8] dão a entender que se necessita, para a base empregada, de mais funções na base para se chegar a valores mais precisos para estados excitados de mais alta ordem.

Além dos valores da energia do estado fundamental dos sistemas de Barbanis (isotrópico e anisotrópico) e das energias dos estados excitados, consegue-se, através do cálculo variacional linear, os valores dos coeficientes das funções que compõem a função variação. Tais coeficientes podem ser utilizados para o cálculo da velocidade [10,11].

$$\vec{v} = \vec{\nabla} \ln \Psi,$$

sendo  $\Psi$  a função variação do problema em questão. Tal velocidade é utilizada no cálculo da energia do estado fundamental quando se utiliza o formalismo hidrodinâmico da mecânica quântica [10,11], onde:

$$E - V = \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} - \frac{1}{2} m (\vec{v} \cdot \vec{v}),$$

sendo  $V = \frac{1}{2} (k_1 x^2 + k_2 y^2) - \alpha xy^2$ .

Como continuação deste trabalho, as funções variação encontradas para os sistemas de Barbanis podem, agora, ser utilizadas no cálculo variacional da energia do estado fundamental de

um sistema de 3 bósons, interagindo 2 a 2 através dos potenciais de Barbanis.

APÊNDICE ARESOLUÇÃO DAS INTEGRAIS NO CÁLCULO VARIACIONALDA ENERGIA DO ESTADO FUNDAMENTAL DO ÁTOMO DEHÉLIO

As integrais abaixo aparecem no cálculo variacional da energia do estado fundamental do átomo de hélio, tendo como função variação a função:

$$\Phi = \psi_1 \psi_2 = \left[ \frac{Z'^3}{\pi a_0^3} \right] e^{-Z' \rho_1} e^{-Z' \rho_2}, \quad (\text{A.1})$$

sendo  $Z'$  o número atômico e  $a_0$  o raio de Bohr. As funções  $\psi_1$  e  $\psi_2$  obedecem à eq.:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = Z' \frac{e^2}{r} \psi - Z'^2 E_H \psi,$$

com  $E_H = \frac{me^4}{2\hbar^2}$ , e são normalizadas para a unidade, isto é:

$$\int \psi^* \psi d\tau = 1.$$

$$1^a) \int \Phi^* \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \right] \Phi d\tau = \int \psi_1^* \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \right) \psi_1 d\tau_1 \quad \times$$

$$\int \psi_2^* \psi_2 d\tau_2 = \int \psi_1^* \left( \frac{Z'e^2}{r_1} - Z'^2 E_H \right) \psi_1 d\tau_1 =$$

$$= Z'e^2 \int \psi_1^* \frac{1}{r_1} \psi_1 d\tau_1 - Z'^2 E_H \int \psi_1^* \psi_1 d\tau_1 =$$

$$= 2Z'E_H \int \psi_1^* \frac{1}{\rho_1} \psi_1 d\tau_1 - Z'^2 E_H, \quad (\text{A.2})$$

onde  $\rho_1 = \frac{r_1}{a_0}$  e  $d\tau = r^2 dr \sin\theta d\theta d\phi = r^2 dr d\Omega$ .

$$\begin{aligned}
2^a) \quad 2E_H \int \phi^* \left( \frac{1}{\rho_1} + \frac{1}{\rho_2} \right) \phi \, d\tau &= 4E_H \int \phi^* \frac{1}{\rho_1} \phi \, d\tau = \\
&= 4E_H \int \psi_1^* \frac{1}{\rho_1} \psi_1 \, d\tau_1 \times \int \psi_2^* \psi_2 \, d\tau_2 = \\
&= 4E_H \int \psi_1^* \frac{1}{\rho_1} \psi_1 \, d\tau_1 = 4E_H \frac{Z'^3}{\pi} \int_0^\infty e^{-2Z'\rho_1} \frac{1}{\rho_1} \rho_1^2 \, d\rho_1 \times \\
&\int d\Omega_1 = 4E_H Z' . \tag{A.3}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
3^a) \quad \frac{1}{a_0} \int \phi^* \frac{e^2}{\rho} \phi \, d\tau &= \int \phi^* \frac{e^2}{r_{12}} \phi \, d\tau = \\
&= \left[ \frac{Z'^3}{\pi a_0^3} \right]^2 \int e^{-2Z'r_1/a_0} e^{-2Z'r_2/a_0} \frac{e}{r_{12}} \, d\tau . \tag{A.4}
\end{aligned}$$

Utilizando a notação:

$$\sigma_1 = \frac{2Z'r_1}{a_0} , \quad \sigma_2 = \frac{2Z'r_2}{a_0} \quad \text{e} \quad \sigma = \frac{2Z'r_{12}}{a_0} ,$$

a eq. (A.4) pode ser reescrita na forma:

$$\frac{Z'e^2}{32\pi^2 a_0} \iint \frac{e^{-\sigma_1} e^{-\sigma_2}}{\sigma} \, d\tau'_1 \, d\tau'_2 , \tag{A.5}$$

onde  $d\tau'_1 = \sigma_1^2 d\sigma_1 \sin \theta_1 d\theta_1 d\phi_1 = \sigma_1^2 d\sigma_1 d\Omega_1$ .

A eq. (A.5), a menos do fator constante  $\frac{Z'}{32\pi^2 a_0}$ , é a energia eletrostática de duas distribuições esféricas de electricidade com densidades

$$(e e^{-\sigma_1}) \quad \text{e} \quad (e e^{-\sigma_2}) .$$

Utilizando-se, em (A.5), a expansão:

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{r_{<}^{\ell}}{r_{>}^{\ell+1}} P_{\ell}(\cos \alpha) \quad , \quad (\text{A.6})$$

com  $r_{<} =$  menor  $\vec{r}$  entre  $\vec{r}_1$  e  $\vec{r}_2$  e  $\alpha =$  ângulo entre  $\vec{r}_1$  e  $\vec{r}_2$ , a integral toma a forma:

$$\begin{aligned} & \frac{Z'e^2}{2 a_0} \int_0^{\infty} \sigma_1 e^{-\sigma_1} d\sigma_1 \left\{ \int_0^{\sigma_1} \sigma_2 e^{-\sigma_2} d\sigma_2 + \int_{\sigma_1}^{\infty} \sigma_2 e^{-\sigma_2} d\sigma_2 \right\} = \\ & = \frac{Z'e^2}{2 a_0} \left\{ 2 \int_0^{\infty} \sigma_1 e^{-\sigma_1} d\sigma_1 - \int_0^{\infty} \sigma_1 e^{-2\sigma_1} (\sigma_1 + 2) d\sigma_1 \right\} = \\ & = \frac{5}{4} Z'E_H \quad . \quad (\text{A.7}) \end{aligned}$$

APÊNDICE BFUNÇÃO ERRO

A função erro de  $x$  é definida como:

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-u^2} du ,$$

tendo as seguintes propriedades:

$$\operatorname{erf}(-x) = -\operatorname{erf}(x)$$

$$\operatorname{erf}(0) = 0$$

$$\operatorname{erf}(\infty) = 1.$$

Pode ser calculada numericamente, para qualquer valor de  $x$ , usando-se a aproximação<sup>[12]</sup>:

$$\operatorname{erf}(x) = 1 - e^{-x^2} (A_1 T + A_2 T^2 + A_3 T^3 + A_4 T^4 + A_5 T^5) + R ,$$

onde: 
$$T = \frac{1}{1 + Px}$$

e 
$$P = 0,3275911$$

$$A_1 = 0,254829592$$

$$A_2 = -0,284496736$$

$$A_3 = 1,421413741$$

$$A_4 = -1,453152027$$

$$A_5 = 1,061405429$$

$$R = 1,5 \times 10^{-7}.$$

APÊNDICE C

ELEMENTOS DE MATRIZ PARA O HAMILTONIANO ANISO-  
TRÓPICO DE BARBANIS

Para a função de onda:

$$\Psi(x, y) = \sum_{n, m} a_{nm} N_n N_m e^{-\beta_x \frac{x^2}{2} - \beta_y \frac{y^2}{2}} H_n(\beta_x x) H_m(\beta_y y) \quad (C.1)$$

onde  $H_n$  é o polinômio de Hermite de ordem  $n$ , e o hamiltoniano dado por:

$$H = \frac{p_x^2}{2\mu} + \frac{p_y^2}{2\mu} + k_x \frac{x^2}{2} + k_y \frac{y^2}{2} - \alpha xy^2 ,$$

onde:

$$H_0 = \frac{p_x^2}{2\mu} + \frac{p_y^2}{2\mu} + k_x \frac{x^2}{2} + k_y \frac{y^2}{2} \quad e$$

$$H_p = - \alpha xy^2 ,$$

o cálculo da expressão para os elementos matriciais envolve a seguinte integral:

$$\iint \Psi(x, y) H \Psi(x, y) dx dy = \iint \Psi(x, y) H_0 \Psi(x, y) dx dy + \iint \Psi(x, y) H_p \Psi(x, y) dx dy. \quad (C.2)$$

A primeira integral à direita da igualdade em (C.2) tem a forma (para a função de onda em (C.1)):

$$N_p N_n \int_{-\infty}^{+\infty} H_p(\beta_x x) e^{-\beta_x \frac{x^2}{2}} \left( \frac{p_x^2}{2\mu} + k_x \frac{x^2}{2} \right) H_n(\beta_x x) e^{-\beta_x \frac{x^2}{2}} dx +$$

$$N_q N_m \int_{-\infty}^{+\infty} H_q(\beta_y y) H_m(\beta_y y) e^{-\beta_y \frac{y^2}{2}} dy +$$

$$\begin{aligned}
& + N_p N_n \int_{-\infty}^{+\infty} H_p(\beta_x x) H_n(\beta_x x) e^{-\beta_x x^2} dx \quad x \\
& \times N_q N_m \int_{-\infty}^{+\infty} H_q(\beta_y y) e^{-\beta_y \frac{y^2}{2}} \left( \frac{p^2}{2\mu} + k_y \frac{y^2}{2} \right) H_m(\beta_y y) e^{-\beta_y \frac{y^2}{2}} dy = \\
& = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_x \delta_{p,n} \delta_{q,m} + (m + \frac{1}{2}) \hbar \omega_y \delta_{p,n} \delta_{q,m} \quad ,
\end{aligned}$$

onde

$$\omega_x = \sqrt{\frac{k_x}{\mu}} \quad e \quad \omega_y = \sqrt{\frac{k_y}{\mu}} .$$

A segunda integral à direita da igualdade em (C.2) tem a forma:

$$\begin{aligned}
& - \alpha \{ N_p N_n \int_{-\infty}^{+\infty} H_p(\beta_x x) x H_n(\beta_x x) e^{-\beta_x x^2} dx \} \\
& \cdot \{ N_q N_m \int_{-\infty}^{+\infty} H_q(\beta_y y) y^2 H_m(\beta_y y) e^{-\beta_y y^2} dy \} = \\
& = - \alpha \quad A \quad B \quad ,
\end{aligned}$$

onde:

$$A = \int_{-\infty}^{+\infty} u_p(\beta_x x) x u_n(\beta_x x) dx = \begin{cases} \sqrt{\frac{2n}{\omega_x}} , & p = n-1 \\ \sqrt{\frac{2(n+1)}{\omega_x}} , & p = n+1 \\ 0 , & \text{para os demais} \end{cases}$$

e



$$B = \int_{-\infty}^{+\infty} u_q(\beta_y y) y^2 u_m(\beta_y y) dy = \begin{cases} \frac{2m+1}{\omega_y}, & q = m \\ \frac{\sqrt{m(m-1)}}{\omega_y}, & q = m-2 \\ \frac{\sqrt{(m+1)(m+2)}}{\omega_y}, & q = m+2 \end{cases}$$

$$\text{com } u_n(\beta_x x) = N_n H_n(\beta_x x) e^{-\beta_x \frac{x^2}{2}} .$$

APÊNDICE D

INTEGRAIS DOS ELEMENTOS DE MATRIZ DO PO-  
TENCIAL TIPO POÇO QUADRADO

1º) Para a função variação

$$\Psi(r) = \sum_{n=1}^N a_n \frac{r^{2n-1}}{r} e^{-r'^2},$$

com  $r' = \frac{r - \sigma}{\lambda r_0}$ , e o hamiltoniano dado por:

$$H = - \frac{\hbar^2}{2\mu\lambda^2 r_0^2} \nabla_{r'}^2 + V(r'), \quad (D.1)$$

onde

$$V(r') = \begin{cases} \infty, & r' = 0 \\ -V_0, & 0 < r' < \frac{1}{\lambda} \\ 0, & r' > \frac{1}{\lambda} \end{cases}, \quad (D.2)$$

o cálculo da expressão para os elementos matriciais envolve a seguinte integral:

$$\begin{aligned} \Psi(r) &= \sum_n a_n \phi_n(r), \\ \int \phi_n^* H \phi_m d\tau &= 4\pi \int_0^\infty \phi_n^*(r') H \phi_m(r') dr' = \\ &= - \frac{4\pi \hbar^2}{2\mu\lambda^2 r_0^2} \int_0^\infty \phi_n^*(r') \nabla^2 \phi_m(r') \lambda r_0 dr' - \\ &= 4\pi V_0 \int_0^{1/\lambda} \phi_n^*(r') \phi_m(r') \lambda r_0 dr'. \end{aligned} \quad (D.3)$$

A primeira integral à direita da igualdade em (D.3) tem

a forma:

$$\begin{aligned}
 \lambda r_0 \int_0^\infty r'^{2n-1} e^{-r'^2} \frac{\partial^2}{\partial r'^2} (r'^{2m-1} e^{-r'^2}) dr' &= \\
 &= \lambda r_0 \left\{ 4 \int_0^\infty r'^{2(n+m)} e^{-2r'^2} dr' - \right. \\
 &- 2(4m-1) \int_0^\infty r'^{2(n+m-1)} e^{-2r'^2} dr' + \\
 &\left. + (2m-1)(2m-2) \int_0^\infty r'^{2(n+m-2)} e^{-2r'^2} dr' \right\} \quad (D.4)
 \end{aligned}$$

Utilizando a solução:

$$\int_0^\infty x^\alpha e^{-ax^2} dx = \begin{cases} \frac{(2v-1)!!}{2(2a)^v} \sqrt{\frac{\pi}{2}}, & \alpha = 2v \\ \frac{[(2v-1)-1]!!}{(2a)^v}, & \alpha = 2v-1 \\ v = 1, 2, 3, \dots \end{cases}$$

a expressão em (D.4) pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned}
 \lambda r_0 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left\{ 4 \frac{[2(n+m)-1]!!}{2 \cdot (4^{n+m})} - 2(4m-1) \frac{[2(n+m)-3]!!}{2 \cdot (4^{n+m-1})} + \right. \\
 \left. + (2m-1)(2m-2) \frac{[2(n+m)-5]!!}{2 \cdot (4^{n+m-2})} \right\} \quad (D.5)
 \end{aligned}$$

A segunda integral à direita da igualdade em (D.3) tem a forma:

$$\lambda r_0 \int_0^{1/\lambda} r'^{2(n+m-1)} e^{-2r'^2} dr' ,$$

que pode ser resolvida por partes, dando como resultado a expres-

são:

$$\lambda r_0 \{ - \frac{e^{-2/\lambda^2}}{4} \sum_{p=1}^{n+m-1} \frac{[2(n+m-1)-1]!!}{\lambda^{2(n+m-1)-2p+1} 4^{p-1} [2(n+m-1)-2p+1]!!} + \frac{[2(n+m-1)-1]!!}{2 \cdot (4^{n+m-1})} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \} \quad (D.6)$$

2º) Para a função variação:

$$\Psi(r) = \sum_{n=1}^N a_n N_n \frac{e^{-r'^2/2}}{r} H_n(r') \quad ,$$

com  $r' = \frac{r - \sigma}{\lambda r_0}$  e  $n$  ímpar, o hamiltoniano e o potencial sendo aqueles dados em (D.1) e (D.2), o cálculo dos elementos de matriz envolve as mesmas integrais em (D.3), com  $\phi_n(r)$  valendo, agora:

$$\phi_n(r) = \frac{\phi_n(r')}{r} = N_n \frac{e^{-r'^2/2}}{r} H_n(r') \quad ,$$

onde 
$$N_n = \left[ \frac{1}{2\pi\sqrt{\pi} \lambda r_0 2^{n_n} n!} \right]^{1/2} .$$

A primeira integral à direita da igualdade em (D.3) tem, agora, a forma:

$$\lambda r_0 N_n N_m \int_0^\infty H_n(r') e^{-r'^2/2} \frac{\partial^2}{\partial r'^2} [H_m(r') e^{-r'^2/2}] dr' \quad (D.7)$$

Lembrando que a equação de Schrödinger para o oscilador harmônico é da forma:

$$\frac{d^2 u_n}{dr'^2} + [\chi_n - r'^2] u_n = 0 \quad ,$$

onde  $\chi_n = \frac{2E_n}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{k}} = 2n+1$ , para  $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar \sqrt{\frac{k}{m}}$ , e

$$u_n = N'_n e^{-r'^2/2} H_n(r'), \text{ para } N'_n = \left[ \frac{1}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (\text{D.8})$$

a equação (D.7) pode ser reescrita na forma:

$$\frac{1}{2\pi\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2^n n! 2^m m!}} \int_0^\infty H_n(r') e^{-r'^2/2} [r'^2 - (2m+1)] H_m(r') e^{-r'^2/2} dr',$$

que tem por solução:

$$\frac{1}{4\pi\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2^n n! 2^m m!}} \left\{ \sqrt{\pi} \sqrt{2^n n! 2^m m!} (r'^2)_{n,m} - (2m+1) \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{n,m} \right\}.$$

A expressão  $(r'^2)_{n,m}$  é da forma:

$$N'_n N'_m \int_0^\infty H_n(r') r'^2 H_m(r') e^{-r'^2} dr' = \begin{cases} \frac{\sqrt{(n+1)(n+2)}}{2}, & m = n+2 \\ \frac{\sqrt{n(n-1)}}{2}, & m = n-2 \\ \frac{2n+1}{2}, & m = n \end{cases}.$$

A segunda integral à direita da igualdade em (D.3) tem a forma:

$$\lambda r_0 \int_0^{1/\lambda} H_n(r') H_m(r') e^{-r'^2} dr'; \quad (\text{D.9})$$

para encontrar a solução desta integral deve-se utilizar a definição de  $H_n(x)$  na forma diferencial:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2}) ,$$

e resolvê-la por partes sucessivas vezes. O resultado encontrado é:

$$\lambda r_{0n} N_n N_m \left\{ -2^m m! H_{n-m-1}(1/\lambda) e^{-1/\lambda^2} - \sum_{i=1}^m H_{m-i+1}(1/\lambda) H_{n-i}(1/\lambda) 2^{i-1} e^{-1/\lambda^2} \frac{m!}{(m-i+1)!} \right\}, \text{ pa}$$

ra  $n > m$

e

$$\lambda r_{0n} N_n^2 \left\{ 2^n n! \sqrt{\frac{\pi}{2}} \operatorname{erf}(1/\lambda) - \left( \sum_{i=1}^n H_{n-i+1}(1/\lambda) H_{n-i}(1/\lambda) 2^{i-1} \right) \left( e^{-1/\lambda^2} \frac{n!}{(n-i+1)!} \right) \right\}, \text{ para } n = m ,$$

onde  $\operatorname{erf}(1/\lambda)$  é a função erro definida no apêndice B.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. PAULING, L. & WILSON, E.B. Introduction to quantum mechanics. New York, McGraw-Hill Book Company, Inc., 1935.
2. NORDHOLM, K.S.J. & RICE, S.A. Quantum ergodicity and vibrational relaxation in isolated molecules. The Journal of Chemical Physics, 1(61), 1974.
3. MESSIAH, A. Quantum mechanics. New York, John Wiley & Sons, Inc., 1973.
4. SCHIFF, L.I. Quantum mechanics. New York, McGraw-Hill Book Company, Inc., (1965).
5. GOURLAY, A.R. & WATSON, G.A. Computational methods for matrix eigenproblems. New York, John Wiley & Sons, Inc., 1973.
6. CONTE, S.D. Elementos de análise numérica. Porto Alegre, Editora Globo, 1971.
7. CABRAL, F. Ground state energy of molecular trimers. Tese de Doutorado, University of Wisconsin, 1979.
8. STRATT, R.M.; HANDY, N.C. & MILLER, W.H. On the quantum mechanical implications of classical ergodicity. The Journal of Chemical Physics, 8(71), 1979.
9. PRAGER, S. & HIRSCHFELDER, J.O. Upper and lower bounds for ground-state second-order perturbation energy. The Journal of Chemical Physics, 12(39), 1963.
10. HIRSCHFELDER, J.O.; GOEBELL, C.J. & BRUCH, L.W. Quantized vortices around wavefunction nodes II. The Journal of Chemical Physics, 12(61), 1974.
11. HIRSCHFELDER, J.O. The angular momentum, creation and significance of quantized vortices. The Journal of Chemical Physics, 12(67), 1977.
12. ABRAMOVITZ, M. & STEGUN, I.A. Handbook of mathematical functions with formulas, graphs and mathematical tables. New York, Dover Publications, Inc., 1970.