Trabalho Prático 2. Método variacional:

aplicação ao átomo de hidrogénio

$$\langle E \rangle = \langle \phi | H | \phi \rangle = \int \phi^* \left(H\phi \right) d\tau$$

$|\phi\rangle$ **é a solução exata normalizada para o estado fundamental do átomo de hidrogénio**

$$H = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r}$$

$$d\tau = r^2 \; sen\theta \; dr \; d\theta \; d\varphi \qquad 0 \le r \le \infty \; ; \; 0 \le \theta \le \pi \; ; \; 0 \le \varphi \le 2\pi$$

Considerando a função teste $|\psi\rangle$

1º Normaliza-se a Função

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 = \int \psi^* \psi \; d\tau$$

Como

$$d\tau = r^2 \; sen\theta \; dr \; d\theta \; d\varphi \qquad 0 \le r \le \infty \; ; \; 0 \le \theta \le \pi \; ; \; 0 \le \varphi \le 2\pi$$

Teremos:

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \text{sen } \theta \; d\theta \int_0^{\infty} \psi^* \psi \; r^2 dr$$

2º Energia Cinética

$$\langle T\rangle = \left\langle \psi \left| -\frac{1}{2}\nabla^2 \right| \psi \right\rangle$$

2º Energia Cinética

$$T\,|\psi\rangle = -\frac{1}{2}\nabla^2\,|\psi\rangle$$

Como:

$$\nabla_r^2 f(r) = r^{-2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)f(r)$$

Teremos:

$$T\,|\psi\rangle = -\frac{1}{2}\nabla^2\,|\psi\rangle = -\frac{r^{-2}}{2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\psi\right)$$

Como:

$$\langle T \rangle = \left\langle \psi \left| -\frac{1}{2}\nabla^2 \right| \psi \right\rangle$$

Temos:

$$\left\langle \psi \left| -\frac{1}{2}\nabla^2 \right| \psi \right\rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \text{sen } \theta \; d\theta \int_0^{\infty} \psi^* \left\{ \frac{-r^{-2}}{2} \frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{d}{dr}\psi \right) \right\} r^2 dr$$

3º Energia Potencial

Como:

$$\langle V \rangle = \left\langle \psi \left| -\frac{1}{r} \right| \psi \right\rangle$$

Temos:

$$\left\langle \psi \left| -\frac{1}{r} \right| \psi \right\rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \text{sen } \theta \ d\theta \ \int_0^{\infty} \psi^* \left(-\frac{1}{r} \right) \psi \ r^2 dr$$

Finalmente:

(i) Determina-se a expressão da energia que depende do parâmetro variacional (α):

$$\langle E \rangle = \langle V \rangle + \langle T \rangle \equiv E(\alpha)$$

(ii) Determina-se o valor de α para o qual $<E>$ é mínimo:

$$\frac{dE(\alpha)}{d\alpha} = 0$$

(iii) Determina-se o valor de energia correspondente de $E(\alpha)$.