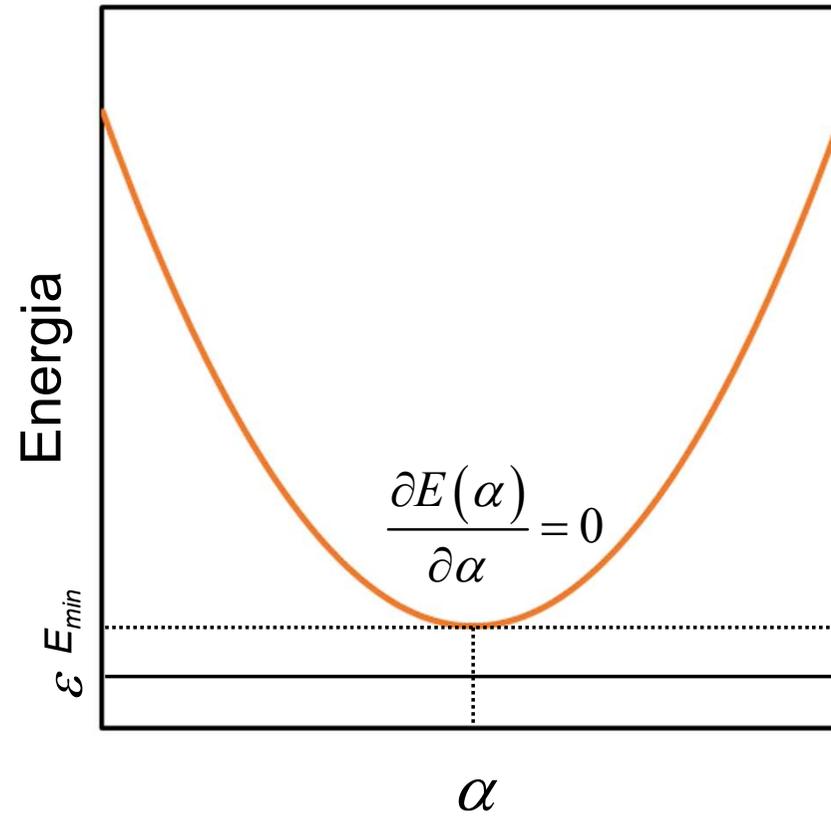


# **Trabalho Prático 2b.**

Princípio Variacional: Aplicação ao  
Átomo de Hidrogénio

# PRINCÍPIO VARIACIONAL



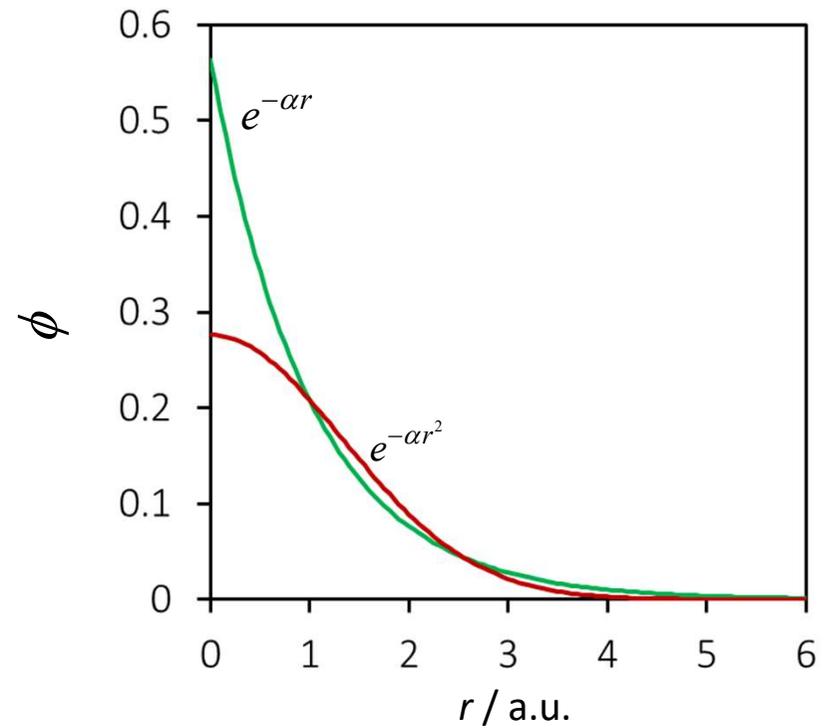
**Neste trabalho serão consideradas duas funções teste:**

Uma função do tipo Slater:

$$|\psi\rangle = Ne^{-\alpha r}$$

Uma função Gaussiana:

$$|\psi\rangle = Ne^{-\alpha r^2}$$



1) Construa um programa em Python que:

a) Permita calcular  $E(\alpha)$  em função de  $\alpha$

b) Determine numericamente o mínimo de  $E(\alpha)$

c) Permita calcular as funções de onda em função de  $r$

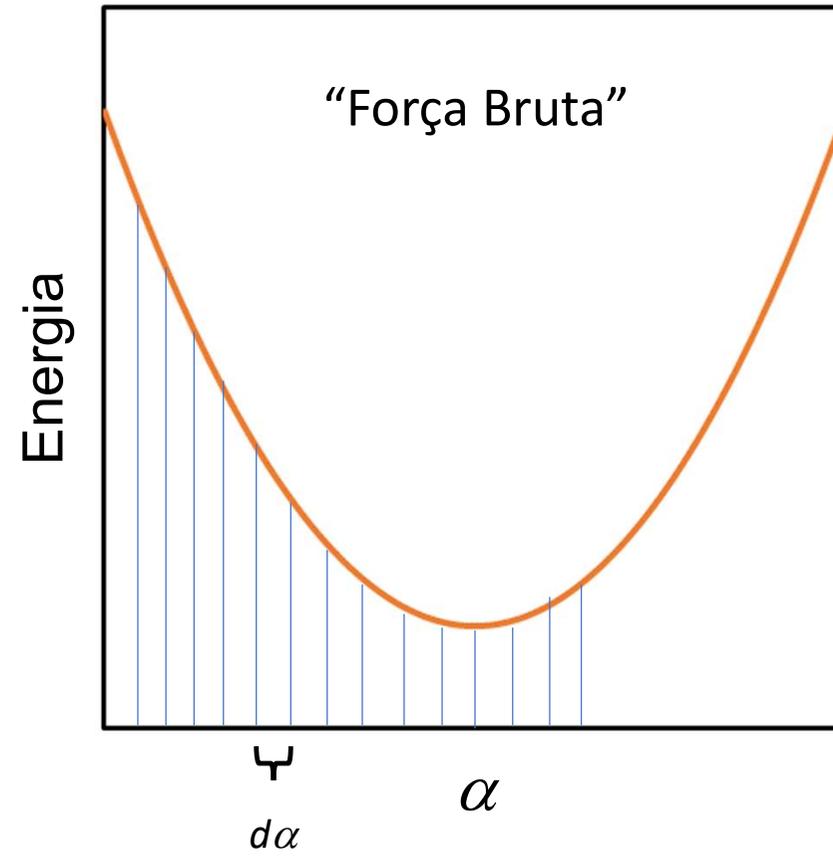
$$|\psi\rangle = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} e^{-\alpha r}$$

$$E(\alpha) = \frac{1}{2} \alpha^2 - \alpha$$

$$|\psi\rangle = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{4}} e^{-\alpha r^2}$$

$$E(\alpha) = \frac{3\alpha}{2} - 2\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}$$

# PRINCÍPIO VARIACIONAL



# Funções em Python

Uma função é uma sequência de comandos que executam uma tarefa e que tem um nome. A sua principal finalidade é ajudar a organizar os programas em secções, ou simplifica-los quando uma tarefa tem de ser repetida várias vezes ao longo do código.

Na definição de uma função, a palavra reservada no cabeçalho é **def**, que é seguida pelo nome da função e alguns parâmetros entre parênteses.

```
def soma(x,y):  
    val = x + y  
    return(val)  
  
# Programa principal  
  
A = 9  
B = 10  
print ("Soma A+B=" + str(soma(A,B)))
```

# Funções em Python

Determinar o valor mínimo de uma função:

```
def Y(x):
    val = x**2
    return(val)

# Programa Principal
x = -10
y_minimo = Y(x)
x_minimo = x

while x < 10:
    y1 = Y(x)
    if y_minimo > y1:
        y_minimo = y1
        x_minimo = x
    x += 0.0001

x_minimo = round(x_minimo,4)
y_minimo = round(y_minimo,4)

print ('O valor de x no mínimo é ' + str(x_minimo))
print ('e o valor da função é ' + str(Y(x_minimo)))
```

2) Calcule a distribuição de probabilidade  $|\psi|^2$

e função de densidade de probabilidade radial  $P(r)$

$$P(r) \approx 4 \cdot \pi \cdot r^2 |\psi|^2 \cdot \Delta r$$

