Primeiro semestre - 2022

7600065 - Mecânica Quântica Computacional

Lembre-se de ler as instruções gerais que valem para todos os projetos da disciplina. Esse documento é apenas um guia. Os detalhes do projeto foram discutidos em aula.

Projeto 4: Uma abordagem variacional

Você pode utilizar as unidades que achar mais convenientes. No entanto, deixe claro com quais unidades está trabalhando. Os potenciais dos exercícios têm parâmetros que serão escolhidos por você.

1) Considere o poço infinito unidimensional,

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } 0 < x < 1, \\ \infty, & \text{caso contrário,} \end{cases}$$
 (1)

e a função de onda teste

$$\psi_T(x) = \begin{cases} x(1-x), & \text{se } 0 < x < 1, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$
 (2)

- a) Justifique essa escolha de função de onda teste.
- b) Utilize o método de Monte Carlo variacional para obter a energia do estado fundamental. Compare os seus resultados com a energia variacional calculada analiticamente,

$$E_T = \frac{\int dx \ \psi_T^* H \psi_T}{\int dx \ \psi_T^* \psi_T}.$$
 (3)

- c) Investigue a dependência da taxa de aceitação com as tentativas de mudança (parâmetro Δ da Ref. [1]). Para qual valor de Δ você obtém uma aceitação de $\approx 50\%$?
 - 2) Considere um oscilador harmônico em duas dimensões,

$$V(x,y) = \frac{m}{2}(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2),$$
(4)

com $\omega_x \neq \omega_y$. Utilize uma função de onda teste gaussiana, onde as duas larguras são parâmetros variacionais. Utilize o método de Monte Carlo variacional para obter a energia do estado fundamental. Mostre que a menor energia corresponde às larguras que coincidem com a solução analítica conhecida.

3a) Escolha um potencial e deixe claro os parâmetros utilizados e em quantas dimensões você está trabalhando.

- b) Proponha uma função de onda teste. Justifique sua escolha.
- c) Utilize o método de Monte Carlo variacional para obter a energia do estado fundamental. Faça as discussões e comparações que achar pertinentes.

Seu relatório deve ter no **máximo** 5 páginas.

Bibliografia:

- [1] Rodrigo Canabrava e Silvio A. Vitiello. Partícula em um poço de potencial infinito e o método variacional de Monte Carlo. Rev. Bras. Ensino Fís. 25 (1), 2003.
- [2] Marcelo A. dos Reis e S.A. Vitiello. Método Variacional com Monte Carlo aplicado ao oscilador harmônico quântico. Rev. Bras. Ensino Fís. 28 (1), 2006.