

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 1: Quantização semi-clássica

Você pode utilizar as unidades que achar mais convenientes. No entanto, deixe claro com quais unidades está trabalhando.

1) Considere uma molécula diatômica cuja interação entre os núcleos pode ser descrita por um potencial harmônico:

$$V(r) = \frac{m\omega^2 r^2}{2}. \quad (1)$$

Ao aplicarmos a aproximação de Born-Oppenheimer e a regra de quantização de Bohr-Sommerfeld, chegamos a uma equação para as energias dos estados vibracionais. Escreva um programa que resolva essa equação e determine os estados vibracionais da molécula diatômica.

a) Calcule o espectro de energia dos primeiros 10 estados ( $n = 0, \dots, 9$ ). Para o potencial harmônico, esse resultado é conhecido. Qual é o erro relativo ao comparar as suas energias obtidas numericamente com os resultados analíticos?

b) Faça um gráfico com as trajetórias no espaço de fase,  $p \times r$ . Elas concordam com o resultado conhecido?

2) Modifique o seu programa para utilizar o potencial de Lennard-Jones:

$$V(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]. \quad (2)$$

Seu programa deve ter como entrada a quantidade:

$$\gamma = \left( \frac{2m\sigma^2\epsilon}{\hbar^2} \right)^{1/2}. \quad (3)$$

a) Qual é o espectro de energia para os estados vibracionais da molécula de  $\text{H}_2$  ( $\gamma = 21,7$ )? E para  $\text{HD}$  ( $\gamma = 24,8$ )? Explique qualitativamente as diferenças tendo em mente a diferença de massas entre o próton e o dêuteron.

b) Faça um gráfico das trajetórias no espaço de fase ( $p \times r$ ) para as duas moléculas do item a). Considere apenas um valor de  $n$ , porém o mesmo para as duas moléculas.

3) É possível aproximar o mínimo do potencial de Lennard-Jones, Eq. (2), por uma parábola.

a) Escreva qual é a posição do mínimo e sua profundidade.

b) Mostre que a frequência de pequenas oscilações ao redor desse mínimo é de:

$$\omega = \frac{6 \times 2^{5/6} \epsilon}{\hbar \gamma}. \quad (4)$$

c) Calcule o espectro de energias ( $n = 0, \dots, 9$ ) do potencial de Lennard-Jones para  $\gamma = 50, 100$  e 1000. Utilize as relações obtidas no item 3a) e b) para comparar os resultados obtidos com o item 1a). Discuta qual é o impacto de aproximar o potencial de Lennard-Jones por uma parábola para diferentes valores de  $\gamma$ . Por que a aproximação é pior para os estados de maior energia?

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

Bibliografia: Computational Physics: Fortran Version, S.E. Koonin e D.C. Meredith (Addison-Wesley, 1990). Seção 1.4 “Semiclassical quantization of molecular vibrations”.