Física Computacional I

Lista 8

Jacinto Paulo da Silva Neto

Universidade Federal do Rio Grande do Norte

Departamento de Física

11 de Maio de 2019

1. Demonstrações

Problema 4

(a)

$$\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x), \quad \hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \quad \text{e} \quad \psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty}\psi_n sin\frac{\pi n x}{L}} \tag{1}$$

A partir das relações acima, podemos fazer

$$\hat{H}\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty}\psi_n \hat{H} sin\frac{\pi n x}{L} = \sum_{n=1}^{\infty} E\psi_n sin\frac{\pi n x}{L}$$

$$\sum_{n=1}^{\infty}\psi_n sin\frac{\pi m x}{L}\hat{H} sin\frac{\pi n x}{L} = \sum_{n=1}^{\infty} E\psi_n sin\frac{\pi m x}{L} sin\frac{\pi n x}{L}$$

$$\sum_{n=1}^{\infty}\psi_n \int_0^L \left[sin\frac{\pi m x}{L}\hat{H} sin\frac{\pi n x}{L}\right]dx = \sum_{n=1}^{\infty} E\psi_n \int_0^L \left[sin\frac{\pi m x}{L} sin\frac{\pi n x}{L}\right]dx,$$

desde que

$$\int_0^L sin\frac{\pi m x}{L} sin\frac{\pi n x}{L} = \frac{L}{2}\delta_{mn}, \tag{2}$$

então

$$\boxed{\sum_{n=1}^{\infty}\psi_n \int_0^L \left[sin\frac{\pi m x}{L}\hat{H} sin\frac{\pi n x}{L}\right]dx = \frac{L}{2}E\psi_m}. \tag{3}$$

Fica simples agora mostrar que

$$\sum_{n=1}^{\infty} H_{mn}\psi_n = \frac{2}{L}\sum_{n=1}^{\infty}\psi_n \int_0^L \left[sin\frac{\pi m x}{L}\hat{H} sin\frac{\pi n x}{L}\right]dx = E\psi_m$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} H_{mn}\psi_n = E\psi_m, \tag{4}$$

a equação acima é uma equação matricial sobre o índice m, tal que pode ser reescrita da seguinte forma

$$\boxed{\boldsymbol{H}\vec{\psi} = E\vec{\psi}.} \tag{5}$$

(b) Quando temos um potencial do tipo $V(x) = ax/L$, os elementos da matriz hamiltoniana (energética) ficam

$$H_{mn} = \frac{2}{L}\int_0^L sin\frac{\pi m x}{L}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{ax}{L}\right] sin\frac{\pi n x}{L}dx$$

$$= \frac{2}{L}\int_0^L sin\frac{\pi m x}{L}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\left(sin\frac{\pi n x}{L}\right) + \frac{ax}{L} sin\frac{\pi n x}{L}\right]dx,$$

onde

$$\frac{d^2}{dx^2}\left(sin\frac{\pi n x}{L}\right) = -\frac{\pi^2 n^2}{L^2}\left(sin\frac{\pi n x}{L}\right),$$

teremos

$$H_{mn} = \frac{2}{L}\left[\frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2mL^2}\int_0^L sin\frac{\pi m x}{L} sin\frac{\pi n x}{L}dx \, + \, \frac{a}{L}\int_0^L x \, sin\frac{\pi m x}{L} sin\frac{\pi n x}{L}dx\right].$$

Podemos aplicar as condições dadas no problema sobre a segunda integral acima e as condições para a primeira que decorrem da equação (2) para computarmos os eletemos da matriz $\boldsymbol{H}$. Logo,

- Caso $m = n$, obtemos os termos da diagonal H_{nn}:

$$\boxed{H_{nn} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2\, m\, L^2} + \frac{1}{2} a} \tag{6}$$

- Caso $m \neq n$, os dois com mesma paridade: se n é ímpar, m também será.

$$\boxed{H_{mn} = 0} \tag{7}$$

- Caso $m \neq n$, os dois com paridade diferente: se n é ímpar, m será par e vice-versa.

$$\boxed{H_{mn} = -\frac{8a}{\pi^2} \frac{m\, n}{(m^2 - n^2)^2}}. \tag{8}$$

Através das equações (6, 7 e 8) podemos notar que $\boldsymbol{H}$ é, portanto, simétrica e real.

Calculando a constante de normalização da função de onda $\psi(x)$

$$\langle \psi | \psi \rangle = C^2 \sum_{n,m=1}^{\infty} \psi_n^* \psi_m \int_0^L dx \left[sin \frac{\pi n x}{L} \, sin \frac{\pi m x}{L} \right] = 1$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = \frac{L C^2}{2} \sum_{n,m=1}^{\infty} \psi_n^* \psi_m \delta_{nm} = 1$$

$$\boxed{C = \sqrt{\frac{2}{L \sum_n |\psi_n|^2}}}$$