

Implementação do Método variacional para resolver o Oscilador Harmônico e o modelo de Kronig-Penney

Filipe Gonçalves Jacinto

04 de Outubro de 2021

Contents

1	Introdução:	1
2	Metodologia:	2
2.1	Método Variacional:	2
2.2	Algortimo:	3
3	Resultados e Discussão:	5
3.1	Oscilador Harmônico Quântico:	5
3.2	Modelo de um sólido 1D:	5

1 Introdução:

Uma das equações mais importantes da mecânica quântica é a Equação de Schoroedinger Independente do Tempo(ESIT) descrita na equação 1.Através da ESIT é possível calcular o espectro de energia do sistema. Contudo, resolver esta equação não é algo trivial, e a maior parte dos potencias não tem solução analítica e portanto se faz necessário o uso de métodos alternativos como o variacional para resovler esta equação numericamente.

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (1)$$

Um dos problemas mais importantes da mecânica quântica é o potencial do oscilador harmônico (equação 2), este sistema tem solução analítica bem conhecida descrito na equação (3) e pode ser utilizado para testar a eficiência do método variacional para resolver a ESIT.

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 \left(x - \frac{a}{2}\right)^2 \quad (2)$$

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (3)$$

Em seguida de forma a estudar um potencial mais complicado, o método variacional será utilizado para calcular a dispersão de energia $E(K)$ no modelo de Kronig Penney que é descrito no potencial periódico da equação 4. Este modelo é uma simplificação e descreve um cristal unidimensional perfeito mostrando o comportamento das bandas de energia nesse sistema. Além disso, este sistema também possui solução analítica e portanto permite a comparação com o resultado obtido por meio do método variacional.

$$V(x) = V(x+a) = \begin{cases} 0 & 0 < x < \frac{a-b}{2} \\ V_0 & \frac{a-b}{2} \leq x \leq \frac{a+b}{2} \\ 0 & \frac{a+b}{2} < x < a \end{cases}$$

Desse modo, este trabalho irá estudar por meio do método variacional os problemas do Oscilador Harmônico quântico e o modelo de Kronig Penney. Para isso, será discutido a base teórica e o algoritmo utilizado para resolver de forma numérica a equação de Schrödinger referente a cada potencial utilizando o método variacional.

2 Metodologia:

2.1 Método Variacional:

O método variacional é uma forma de calcular a energia do estado fundamental e de alguns dos primeiros estados excitados utilizando o princípio variacional. Para isso, o método utiliza um conjunto de funções que formam uma base para o sistema denominadas como funções teste. Então expandindo a função de onda $|\psi\rangle$ usando uma superposição de autoestados da base, pode-se resolver o problema através da base escolhida.

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n |\psi_n\rangle \quad (5)$$

Através de uma álgebra simples pode-se reescrever o problema na forma matricial, o que é bem útil do ponto de vista computacional já que o torna o

sistema mais simples de tratar modo geral. A partir da equação de auto-valor pode-se utilizar a expansão proposta anteriormente para obter a equação 8.

$$\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad (6)$$

$$\sum_n c_n \langle \psi_m | \hat{H} | \psi_n \rangle = \sum_n c_n E_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle \quad (7)$$

$$\sum_n c_n H_{mn} = \sum_n c_n E_n S_{mn} \quad (8)$$

Como vamos utilizar bases normalizadas $S_{mn} = \delta_{mn}$, ou seja a matriz identidade. Seguindo em frente, a hamiltoniana do problema consiste em uma parte cinética (\hat{T}) e a parte do potencial (\hat{V}). E nesta parte está o maior desafio do problema que é construir a matriz hamiltoniana H_{mn} a partir das matrizes da energia cinética (T_{mn}) e do potencial (V_{mn}).

Para escrever a matriz hamiltoniana é necessário escrever os operadores separadamente, e em seguida entender como cada elemento da matriz será calculado à partir de cada operador. As equações 9 até 13 mostram como construir a matriz H_{mn} elemento a elemento.

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \hat{V}(x) \quad (9)$$

$$\langle \psi_m | \hat{H} | \psi_n \rangle = \langle \psi_m | \hat{T} | \psi_n \rangle + \langle \psi_m | \hat{V} | \psi_n \rangle \quad (10)$$

$$T_{mn} = \langle \psi_m | \hat{T} | \psi_n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x) \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi_n(x) dx \quad (11)$$

$$V_{mn} = \langle \psi_m | \hat{V} | \psi_n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x) \hat{V}(x) \psi_n(x) dx \quad (12)$$

$$H_{mn} = T_{mn} + V_{mn} \quad (13)$$

Após construir a matriz hamiltoniana corretamente basta resolver o problema de auto valor. Para isto, existem varias bibliotecas ja implementadas. Neste trabalho o pacote `scipy.linalg` e `numpy.linalg` disponíveis na linguagem Python.

2.2 Algoritmo:

1. Escolher qual o potencial será resolvido;

2. Escolher uma base para o problema, aqui serão utilizadas duas bases escritas nas equações 14 e 15 onde $K_n = \frac{2\pi}{n}$, no caso do problema do potencial de Kronig-Penney é necessário utilizar o teorema de Bloch (equação 16) o que implica que levando em conta um potencial periódico a solução de uma célula unitária é corrigida apenas por um fator de fase e portanto só é necessário resolver a equação dentro de uma única célula unitária;
3. Calcula-se os valores do potencial e da base no intervalo;
4. Contrói-se a matriz do integrando utilizando a equação 18;
5. Integra-se elemento a elemento as matrizes T_{mn} e V_{mn} utilizando um pacote de sua preferência, neste caso foi utilizado a biblioteca de integração do pacote `scipy` em específico o método de Simpson;
6. Soma-se as duas matrizes para construir H_{mn} ;
7. Basta agora utilizar um pacote de algebra linear para resolver o problema de autovalor.

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), n = 0, 1, 2, \dots \quad (14)$$

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \exp(iK_n x), n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (15)$$

$$\psi_{K,n} = \exp(iKx)u_n(x) \quad (16)$$

$$\psi_n = \begin{pmatrix} \psi_n(0) \\ \psi_n(h) \\ \psi_n(2h) \\ \dots \\ \psi_n(a) \end{pmatrix}; V(x) = \begin{pmatrix} V(0) \\ V(h) \\ V(2h) \\ \dots \\ V(3h) \end{pmatrix} \quad (17)$$

$$\psi_m^* \hat{O} \psi_n = \begin{pmatrix} \psi_m^*(0) \hat{O} \psi_n(0) \\ \psi_m^*(h) \hat{O} \psi_n(h) \\ \psi_m^*(2h) \hat{O} \psi_n(2h) \\ \dots \\ \psi_m^*(a) \hat{O} \psi_n(a) \end{pmatrix}; \quad (18)$$

3 Resultados e Discussão:

3.1 Oscilador Harmônico Quântico:

O algoritmo descrito na seção anterior foi então utilizado para calcular as energia E_n do oscilador harmônico, como esperado os primeiros níveis de energia são bem descritos pelo método variacional, contudo perde-se consideravelmente a precisão a partir de $n = 4$ como pode-se ver pela Tabela 1.

A Figura 1 mostra o plot das densidades de probabilidade dos primeiros quatro níveis de energia, dessa forma pode-se compara-los as funções de onda geradas pelos polinômio de Hermite apresentadas na Figura 2. Pode-se ver que os resultados obtidos pelo método variacional concordam bem com os resultados obtidos de forma analítica.

Table 1: Valores de energias calculados utilizando a base do potencial quadrado infinito e os valores teóricos determinados de acordo com a equação 2.

n	Base	Teórico	% ϵ
1	25.0032	25.0	0.01284
2	75.0236	75.0	0.03147
3	125.1766	125.0	0.14135
4	176.0078	175.0	0.57589
5	228.9984	225.0	1.77708
6	286.5936	275.0	4.21586
7	351.3244	325.0	8.09982

3.2 Modelo de um sólido 1D:

O modelo de um sólido 1D como dito anteriormente é descrito pelo modelo de Kronig-Penney utilizando um potencial periódico e o teorema de Bloch. Este modelo simplificado é importante porque deixa claro características do comportamento dos elétrons em um potencial periódico em uma dimensão, como se poder ver pela Figura 3, onde ajustando o tamanho a da barreira de potencial pode-se alterar a dispersão de energia $E(K)$.

Ao analisar a dispersão de energia na Figura 3 pode-se notar também a presença de *bandgaps* ou seja regiões onde não existem estados acessíveis para estes elétrons. Observe que ao aumentar o tamanho da barreira do potencial periódico aumenta também o tamanho dos *bandgaps* de energia.

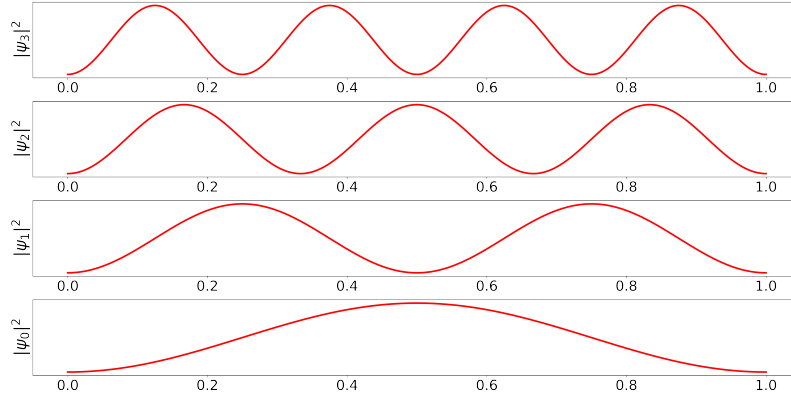


Figure 1: Densidade de probabilidade para os quatro primeiros níveis de energia do oscilador harmônico obtidos utilizando o método varicional.

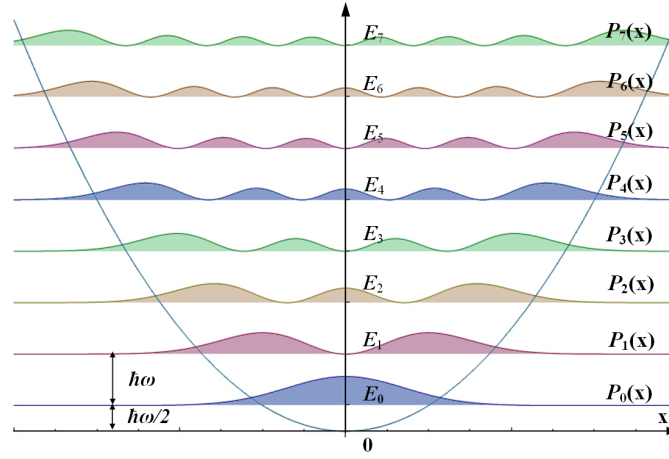


Figure 2: Densidade de probabilidade para os oito primeiros níveis de energia do oscilador harmônico obtidos de forma analítica.

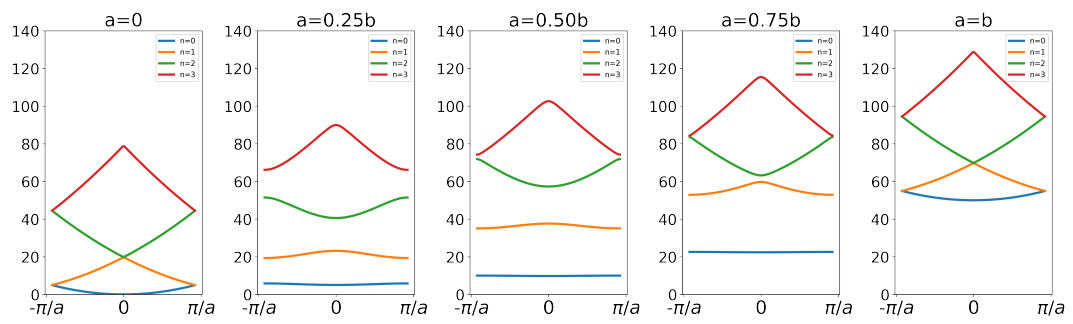


Figure 3: Dispersão de energia $E(K)$ dos primeiros quatro níveis de energia do modelo de Kronig-Penney para um sólido unidimensional.