

Oscilador harmónico de dois centros

NAIA, Marco, FIOLHAIS, Carlos
Departamento de Física da Universidade de Coimbra
3000 COIMBRA

O oscilador harmónico de dois centros é um modelo simples para descrever fenómenos de física molecular (vibrações de uma molécula diatómica) ou de física nuclear (cisão).

Apresenta-se um programa, escrito em Quick-Basic 4.0 para um computador IBM PC compatível (placa gráfica Hercules), que permite obter os valores próprios mais baixos da seguinte equação de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi_n(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} k(|x| - a)^2 \phi_n(x) = E_n \phi_n(x)$$

para vários valores da distância a entre os dois centros, utilizando um método de Euler modificado e condições fronteiras adequadas. Os resultados para $a = 0$ e $a \gg 1$ concordam com os resultados triviais para um e dois osciladores respectivamente.

O programa permite visualizar para cada valor de a o potencial, o espectro de energias mais baixas, as funções de onda correspondentes e as densidades de probabilidade totais para núcleos leves sujeitos a um processo de cisão simétrico descrito por este modelo simples. É possível gravar e ler ficheiros de dados.

Embora o problema considerado tenha solução analítica, a solução computacional apresentada permite ilustrar a utilidade dos microcomputadores na aprendizagem da mecânica quântica. Um potencial de dois centros mais realista pode ser facilmente tratado.

Este programa foi elaborado no âmbito da cadeira de Física Computacional do curso de Física da Universidade de Coimbra, no ano lectivo de 1988/1989.

Bibliografia:

- Merzbacher, E. , "Quantum Mechanics", J. Wiley, New York, 1961, p.66.

- Scharnweber, D. e Greiner,W., "Nuclear Physics" A164 (1971)

257

FISICA COMPUTACIONAL

PROJECTO

DUPLO OSCILADOR QUANTICO

Marco Naia - 1989

prima qualquer tecla para continuar

MENU PRINCIPAL

- A) POTENCIAL
- B) FUNCAO DE ONDA - CALCULO
- C) FUNCAO DE ONDA - LEITURA DE FICHEIROS
- D) ESPECTRO - CALCULO
- E) ESPECTRO - LEITURA DE FICHEIROS
- F) DENSIDADES NUCLEARES - CALCULO
- G) DENSIDADES NUCLEARES - LEITURA DE FICHEIROS
- H) ACABAR

tecle a sua opcao e faca ENTER ■