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 5: A equação de Schrödinger dependente do tempo

1) Para uma Hamiltoniana independente do tempo, a evolução temporal da função de onda é dada pela combinação linear:

$$\psi(x,t) = \sum_n c_n \phi_n(x) \exp\left[-\frac{iE_n t}{\hbar}\right], \tag{1}$$

onde $\phi_n(x)$ são os autoestados com energia E_n.

Considere o oscilador harmônico unidimensional. Vamos trabalhar com unidades de comprimento e energia tais que a equação de Schrödinger independente do tempo a ser resolvida é:

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{x^2}{2}\varphi = E\varphi. \tag{2}$$

a) Escreva os autoestados $\phi_n(x)$ e as autoenergias correspondentes E_n nesse sistema de unidades. Não é preciso demonstrar os resultados, mas certifique-se que eles estão normalizados.

b) Considere o estado inicial $\psi(x,t=0) = \exp\left[-2x^2\right]$. Quantos coeficientes c_n são necessários para descrever esse estado? Qual o critério que você adotou para a sua escolha? A paridade do estado inicial influencia os coeficientes? Faça uma tabela com os c_n encontrados.

c) Utilize a Eq. (1) para evoluir esse estado inicial e calcular $|\psi(x,t)|^2$. Descreva o que você observou. No relatório, inclua uma figura com alguns instantes de tempo significativos. No arquivo de submissão `zip`, inclua um GIF com o nome `oscilador.gif` que contenha a evolução temporal inteira.

d) Considere um novo estado inicial, chamado de estado coerente, dado por:

$$c_n = \sqrt{\frac{\langle n\rangle^n}{n!}\exp\left[-\langle n\rangle\right]}, \tag{3}$$

onde $\langle n\rangle = \langle E\rangle - 1/2$ e $\langle E\rangle$ é o valor esperado da energia do estado coerente. Utilize a Eq. (1) para obter a evolução temporal desse estado. Descreva o que você observou. No relatório, inclua uma figura com alguns instantes de tempo significativos. No arquivo de submissão `zip`, inclua um GIF com o nome `coerente.gif` que contenha a evolução temporal inteira.

2) Considere o estado inicial

$$\psi(x,0) = \left(\frac{1}{2\pi w^2}\right)^{1/4} \exp\left[ik_0(x-x_0)\right] \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4w^2}\right] \tag{4}$$

incidindo em uma barreira da forma

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x < 0, \\ V_0, & \text{se } 0 \leqslant x \leqslant a, \\ 0, & \text{se } x > a. \end{cases} \tag{5}$$

Escreva um programa que utilize o algoritmo descrito na Ref. [1] (Sec. 16.5) para computar a evolução temporal de $|\psi|^2$. Note que a equação (16.33b) dessa referência está errada. A equação correta é:

$$I(x, t + 3\Delta t/2) = I(x, t + \Delta t/2) - \hat{H} R(x, t + \Delta t)\Delta t, \tag{6}$$

como pode ser verificado na Ref. [2]. Utilize: $x_0 = -15$, $k_0 = w = a = 1$ e:

a) $V_0 = 2$.

b) $V_0 = -2$.

Para os dois itens descreva o que você observou e compare com o que seria esperado para uma partícula clássica. No relatório, inclua uma figura com alguns instantes de tempo significativos. No arquivo de submissão `zip`, inclua GIFs com os nomes `2a.gif` e `2b.gif` que contenham a evolução temporal inteira.

Seu relatório deve ter no **máximo** 6 páginas.

Bibliografia:

[1] An Introduction to Computer Simulation Methods, H. Gould, J. Tobochnik e W. Christian (terceira edição, Addison-Wesley, 2006). Seções 16.4 e 16.5 "Time development of eigenstate superpositions" e "The time-dependent Schrödinger equation".

[2] P.B. Visscher, "A fast explicit algorithm for the time-dependent Schrödinger equation", Computers in Physics 5, 596-598 (1991) `https://doi.org/10.1063/1.168415`