

Segundo semestre - 2021

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 2: Soluções numéricas da equação de Schrödinger unidimensional

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

Considere a equação de Schrödinger independente do tempo para uma partícula em uma dimensão:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x) = E\psi. \quad (1)$$

1) Esse item deve ser resolvido analiticamente. Considere uma partícula livre, $V(x) = 0$, na região $-L \leq x \leq L$.

a) Encontre as autoenergias e autoestados permitidos.

b) Defina novas grandezas e mostre que você pode escrever a Eq. (1), as autoenergias e autoestados do item a) de maneira adimensional.

c) Escreva a função de onda normalizada para o caso em que $\psi(0)$ e $\psi'(0)$ são conhecidos.

2) Esse item também deve ser resolvido analiticamente. Considere agora o poço infinito,

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } -L \leq x \leq L, \\ \infty, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2)$$

a-b) Mesmo que os itens 1a-b).

c) Discuta as soluções encontradas em termos de sua paridade.

3) Escreva um programa que encontre as soluções numéricas da Eq. (1) para o caso da partícula livre em uma região $-L \leq x \leq L$. Seu programa deve receber como entrada a energia da partícula, L , $\psi(0)$ e $\psi'(0)$. Não esqueça de normalizar as soluções encontradas.

a) Utilize a seguinte discretização da derivada segunda:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} \approx \frac{\psi(x + \delta x) - 2\psi(x) + \psi(x - \delta x)}{(\delta x)^2}. \quad (3)$$

b) Modifique o seu programa para utilizar o método de Numerov ao invés da discretização do item a).

c) Compare os seus resultados dos itens a) e b), utilizando os mesmos parâmetros de entrada, com a solução analítica do item 1c). Qual é o erro cometido utilizando-se cada um dos métodos? Discuta brevemente as suas conclusões.

4) Escreva um programa que encontre as soluções numéricas da Eq. (1) para o caso do poço infinito, Eq. (2), utilizando o método do chute. Seu programa deve receber como entrada a paridade da solução desejada. Encontre as 10 primeiras autoenergias para um dado valor de L . Compare seus resultados com as soluções analíticas do item 2). Qual é o erro relativo?

5) Escreva um programa que encontre o estado fundamental da Eq. (1) para o caso do potencial de Lennard-Jones,

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

utilizando o método do encontro. Escolha os valores de ϵ e σ que você desejar. Não esqueça de normalizar as soluções encontradas.

a) Faça um gráfico de $V(x)$.

b) Determine a energia do estado fundamental E_0 .

c) Faça um gráfico mostrando a função de onda do estado fundamental.

d) Faça um gráfico mostrando as funções de onda obtidas integrando-se para a direita e para esquerda para outras duas energias: uma maior que E_0 e outra menor. Foque na região ao redor do ponto de encontro escolhido. Discuta brevemente o que você observou.

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

Bibliografia: Computational Physics, N. J. Giordano e H. Nakanishi (segunda edição, Pearson, 2006). Seções 10.1 e 10.2: “Time-independent Schrödinger equation: some preliminaries” e “One dimension: shooting and matching methods”.