

# O Oscilador Harmônico Quântico

GUILHERME DAMACENA DE CASTRO, 11224150

Instituto de Física, Universidade de São Paulo - SP

Julho, 2022

## Resumo

*O oscilador harmônico é conhecido por ser o sistema mais amplamente estudado e aplicável em toda a física. Neste trabalho, um estudo computacional através do método Runge-Kutta de segunda ordem é proposto como ferramenta para a exploração da física por trás do Oscilador Harmônico Quântico. Um código em PYTHON é disponibilizado para simular a solução numérica da equação de Schrödinger.*

## I. INTRODUÇÃO

O oscilador harmônico quântico é um sistema físico muito estudado em cursos de graduação de física. É um sistema físico muito útil para estudar sistemas moleculares, além de uma enorme gama de outros fenômenos quânticos. O estudo é iniciado com a equação de Schrödinger dependente do tempo (equação (1)), onde  $\hbar$  é a constante de Planck reduzida,  $i$  é a unidade imaginária,  $m$  é a massa da partícula no sistema,  $V(x)$  é o potencial de oscilador harmônico dado pela equação (2) e  $\Psi(x, t)$  é a função de onda do sistema cujas soluções desejam ser encontradas em função de  $x$  (posição no espaço 1D) e  $t$  (tempo a partir de  $t = 0$ s). Na equação (2),  $\omega$  é a frequência natural de oscilação do sistema [1].

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x, t) \quad (1)$$

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

É possível tratar essa equação com separação de variáveis  $\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot \theta(t)$ , o que nos leva à equação de Schrödinger independente do tempo (3), que é uma equação de autofunções  $\psi_n(x)$  e autovalores  $E_n$ .

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (3)$$

As soluções para a equação (3) são conhecidas e dadas pelos polinômios de Hermite  $H_n$  segundo a equação (4). Note que as  $\psi_n$  são ortogonais! Na prática, elas formam uma base ortonormal completa. Os autovalores são dados pela equação (6) [1].

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4)$$

onde

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (5)$$

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (6)$$

Isso significa que a solução geral para a equação (3) é uma combinação linear das  $\psi_n(x)$ . Essa solução pode ser vista na equação (7), onde  $C_n$  são constantes que podem ser determinadas pela equação (8) [1].

$$\psi(x) = \sum_n C_n \psi_n(x) \quad (7)$$

$$C_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n(x) \psi(x) \quad (8)$$

Ao aplicar essa solução na equação dependente do tempo (1), obtemos a solução completa que diz que a função de onda de uma partícula sujeita ao potencial (2) em um estado quântico qualquer pode ser dada pela equação (9).

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0,1,2,\dots} C_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(x) \quad (9)$$

Os coeficientes  $C_n$  em (9) são determinados usando as relações de ortogonalidade e as condições iniciais da função de onda  $\Psi(x, t)$ . É importante notar que, no caso da condição inicial ser uma autofunção do hamiltoniano  $\Psi(x, t = 0) = \psi_n(x)$ , a função de onda completa evolui no

tempo como a equação (10). Ou seja,  $c_k = 0$  se  $k \neq n$  e  $c_k = 1$  se  $k = n$ .

$$\Psi(x, t) = \psi_n e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \quad (10)$$

A expressão em (9) permite que calculemos o valor esperado da posição  $\langle x \rangle$  para cada instante de tempo  $t$ , assim como o valor esperado de outras grandezas, como a energia  $\langle E \rangle$ , que deve ser dado pela equação (6) e o valor esperado de  $x^2$   $\langle x^2 \rangle$ .

O valor esperado da grandeza  $u(t)$  é dado pela equação (11), onde o denominador está presente para garantir a normalização da função de onda. Através disso, é possível calcular  $\langle x \rangle$  que resulta na equação (12), onde a constante complexa  $C$  é dada por (13) [1].

$$\langle u \rangle(t) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi(x, t)^* u(x, t) \Psi(x, t)}{\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)| dx} \quad (11)$$

$$\langle x \rangle(t) = C e^{i\omega t} + C^* e^{-i\omega t} = X_0 \sin(\omega t + \delta) \quad (12)$$

$$C = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sum_n \sqrt{n} C_n^* C_{n-1} \quad (13)$$

A equação (12) mostra que a posição esperada da partícula sob um potencial de oscilador harmônico se comporta como a posição de uma partícula clássica sob um potencial de mola. Além disso, a equação (13) mostra que, se a solução  $\Psi(x, t)$  escolhida for composta apenas por uma das autofunções  $\psi_n$  ou até mesmo por autofunções de apenas pares ou apenas ímpares, o valor esperado da posição  $\langle x(t) \rangle$  é sempre nulo! Note, no entanto que o valor esperado da posição varia no caso de uma solução  $\Psi$  composta por autofunções sequenciais  $\psi_n$ .

O valor esperado do Hamiltoniano também pode ser calculado de forma analítica.

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \langle E \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi(x, t)^* H \Psi(x, t) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[ \sum_m C_m^* e^{\frac{i}{\hbar} E_m t} \psi_m^*(x) \right] H \left[ \sum_n C_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(x) \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[ \sum_m C_m^* e^{\frac{i}{\hbar} E_m t} \psi_m^*(x) \right] \left[ \sum_n C_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} E_n \psi_n(x) \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \sum_{m,n} C_m^* C_n e^{\frac{i}{\hbar} E_m t} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_m^*(x) \psi_n(x) E_n \end{aligned}$$

Aqui lembramos da ortonormalidade das funções  $\psi_n$ .

$$\begin{aligned} &= \sum_{m,n} C_m^* C_n e^{\frac{i}{\hbar} E_m t} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} E_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx \\ &= \sum_n |C_n|^2 E_n \end{aligned}$$

Usando a equação (6), temos finalmente:

$$\langle E \rangle = \hbar\omega \sum_n |C_n|^2 \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

A equação acima está correta no caso de  $\Psi$  estar normalizada. Para garantir a normalização, no entanto, é interessante adicionar a normalização explícita na fórmula. Assim, o valor esperado da energia é dado pela equação (14).

$$\langle E \rangle = \hbar\omega \frac{\sum_n |C_n|^2 (n + \frac{1}{2})}{\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx} \quad (14)$$

## I. O teorema de Ehrenfest

O conhecido teorema de Ehrenfest é um caso específico da evolução temporal dos observáveis segundo a representação de Heisenberg da mecânica quântica:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$$

Paul Ehrenfest mostrou a relação entre a evolução temporal do valor esperado da posição  $\langle x(t) \rangle$  de um sistema quântico e o valor esperado do potencial  $V(x)$  ao qual o sistema está submetido. O teorema é dado pela equação (15).

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = - \langle V'(x) \rangle \quad (15)$$

## II. DESCRIÇÃO DO MÉTODO NUMÉRICO

Para solucionar numericamente a equação de Schrodinger para o oscilador harmônico quântico (equação (1)), o método utilizado foi o Runge-Kutta de 2 ordem.

O Método Runge-Kutta é um método numérico muito útil para simular a evolução temporal de sistemas físicos. Ele leva vantagens sobre o também famoso método de Euler pois melhora a precisão dos resultados sem a necessidade grande diminuição do intervalo de iteração da simulação, o que faz com que o processo computacional seja muito mais eficiente [2]. Uma breve descrição do método é feita a seguir.

## I. Runge-Kutta de 2ª ordem

Seja uma grandeza física  $\phi(t)$  que evolui no tempo e tem primeira derivada  $\dot{\phi}(t)$  bem conhecida. É possível estimar  $\phi(t + dt)$  como descrito pelas equações 17.

$$\begin{cases} \phi(t + dt) = \phi(t) + \dot{\phi}(t) \cdot \frac{dt}{2} \\ \phi(t + \frac{dt}{2}) = \phi(t) + \dot{\phi}(t) \cdot \frac{dt}{2} \end{cases} \quad (16)$$

É possível perceber que, na prática, calculamos um valor  $\phi_{1/2}$  chamado de valor a **meio-passo** da grandeza. O valor a meio passo é calculado utilizando o método de Euler usual! Em seguida, a derivada temporal do valor a meio passo é utilizada para calcular a iteração completa. Isso pode ser feito de forma mais clara definindo fatores  $k_1$  e  $k_2$  da grandeza.

$$\begin{cases} k_{1\phi} = \dot{\phi}(t) \cdot dt \\ \phi_{1/2} = \phi(t) + \frac{k_{1\phi}}{2} \\ k_{2\phi} = \dot{\phi}_{1/2} \cdot dt \\ \phi(t + dt) = \phi(t) + k_{2\phi} \end{cases} \quad (17)$$

## II. Runge-Kutta aplicado ao oscilador harmônico quântico

Partindo da equação (1), é importante notar que a função  $\Psi(x, t)$  é complexa e, portanto, vale  $\Psi(x, t) = R(x, t) + iI(x, t)$ , onde  $i$  é a unidade imaginária. Isso permite que a equação (1) seja dividida em duas, conforme descrito na equação (18).

$$\begin{cases} \hbar \frac{\partial R(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 I(x, t)}{\partial x^2} + V(x)I(x, t) \\ \hbar \frac{\partial I(x, t)}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 R(x, t)}{\partial x^2} - V(x)R(x, t) \end{cases} \quad (18)$$

Note que para que  $\Psi(x, t)$  seja normalizada, é necessário cumprir a condição na equação (19).

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |R(x, t)|^2 + |I(x, t)|^2 dx = 1 \quad (19)$$

Agora, calculamos os coeficientes de runge-kutta como descrito anteriormente nesta seção. Para isso, utilizo a aproximação para segunda derivada dada pela equação (20), onde uma função  $f$  de várias variáveis depende da variável  $u$  [3].

$$\frac{\partial^2 f(u, \vec{x})}{\partial u^2} \approx \frac{f(u + \Delta u, \vec{x}) - 2f(u, \vec{x}) + f(u - \Delta u, \vec{x})}{(\Delta u)^2} \quad (20)$$

Assim, as expressões para os coeficientes de runge-kutta são dadas pelas equações (21) a (24), onde as segundas derivadas são dadas pela equação (20).

$$\begin{cases} k_1^R(x) = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 I(x, t)}{\partial x^2} dt + \frac{1}{\hbar} V(x)I(x, t)dt \\ k_1^I(x) = \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 R(x, t)}{\partial x^2} dt - \frac{1}{\hbar} V(x)R(x, t)dt \end{cases} \quad (21)$$

$$\begin{cases} R_{1/2}(x) = R(x, t) + \frac{1}{2}K_1^R(x) \\ I_{1/2}(x) = I(x, t) + \frac{1}{2}K_1^I(x) \end{cases} \quad (22)$$

$$\begin{cases} k_2^R(x) = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 I_{1/2}}{\partial x^2} dt + \frac{1}{\hbar} V(x)I_{1/2}(x, t)dt \\ k_2^I(x) = \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 R_{1/2}}{\partial x^2} dt - \frac{1}{\hbar} V(x)R_{1/2}(x, t)dt \end{cases} \quad (23)$$

$$\begin{cases} R(x, t + dt) = R(x, t) + K_2^R(x) \\ I(x, t + dt) = I(x, t) + K_2^I(x) \end{cases} \quad (24)$$

As equações anteriores permitem a determinação da atualização temporal das funções  $R(x, t)$  e  $I(x, t)$  de forma iterativa, o que determina completamente a solução numérica de  $\Psi(x, t)$ .

Como o tratamento computacional de qualquer função de duas variáveis, é necessário discretizar as variáveis. Isso exige a divisão do intervalo de posições  $x$  estudado em passos  $dx$  (e o análogo ao intervalo temporal com passos  $dt$ ). É claro que quanto menores os passos  $dt$  e  $dx$ , melhor é a simulação computacional. É importante, no entanto, garantir que a simulação pode ser realizada em um tempo razoável. Portanto é interessante trabalhar com a definição da grandeza  $r$ .

$$r = \frac{dt}{2dx^2} \quad (25)$$

Para realizar a simulação, então, são definidos alguns parâmetros. O domínio da função está em  $-L \leq x \leq L$  e  $0 \leq t \leq t_f$ . Isso permite que reindexemos as coordenadas de posição  $x \rightarrow i$  e tempo  $t \rightarrow n$  como indicado pela equação (26).

$$\begin{cases} x = idx \\ t = ndt \end{cases} \quad (26)$$

$$\langle u \rangle = \frac{\sum_{i=0}^{x/dx} \Psi^*(i, n) u(x, t) \Psi(i, n)}{\sum_{i=0}^{x/dx} \Psi^*(i, n) \Psi(i, n)} \quad (27)$$

Com os valores discretos da função  $\Psi(x, t)$  em passos  $dx$  e  $dt$ , o cálculo de valores esperados é dado pela equação (27), onde o denominador está presente para garantir a normalização da função de onda.

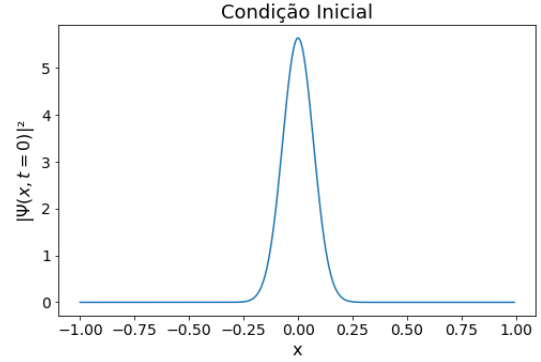
### III. DISCUSSÃO E RESULTADOS

Antes de falar sobre a física tratada computacionalmente, é interessante explorar um aspecto técnico do problema: a variável  $r$  dada pela equação (25). Essa variável relaciona os passos espacial e temporal de forma que, fixo  $r$ , a redução do passo temporal  $dt$  de um fator  $\alpha$  reduz o passo  $dx$  em  $\sqrt{\alpha}$ . Isso é interessante porque a redução de  $dt$  está diretamente relacionada à convergência do método computacional. No entanto, diminuir os passos aumenta o tempo de compilação da simulação. Definir  $r$  da forma como foi definido faz com que o aumento de tempo de compilação não seja muito grande ao diminuir  $dt$ . É interessante ainda perceber que o  $r$  define qual será a grandeza que deve receber maior precisão computacional, afinal, quanto maior for  $r$ , menor é a razão  $\frac{dx}{dt}$  e, quanto menor for  $r$ , maior é a razão  $\frac{dx}{dt}$ . Após alguns testes, foi observado que os valores ótimos de  $r$  e  $dt$  para garantir a convergência da maioria das simulações foram  $r = 0.075 \text{ s/m}^2$  e  $dt = 0.00001 \text{ s}$ . No entanto, é ideal estudar cada simulação individualmente (para diferentes condições iniciais da função de onda) para escolher os parâmetros  $r$  e  $dt$  ideais.

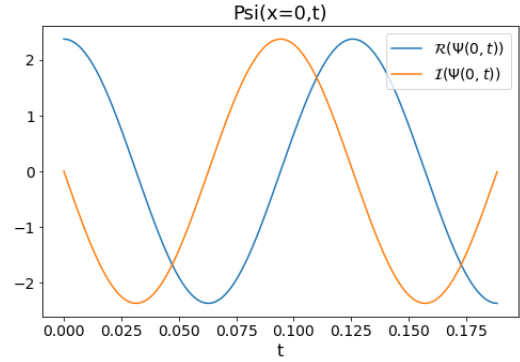
#### I. Estado fundamental

Começamos discutindo o caso em que a condição inicial é dada por  $\Psi(x, t = 0) = \psi_0(x)$ . Uma foto da densidade de probabilidade  $|\Psi(x, t)|^2$  dessa condição inicial pode ser vista na figura 1.

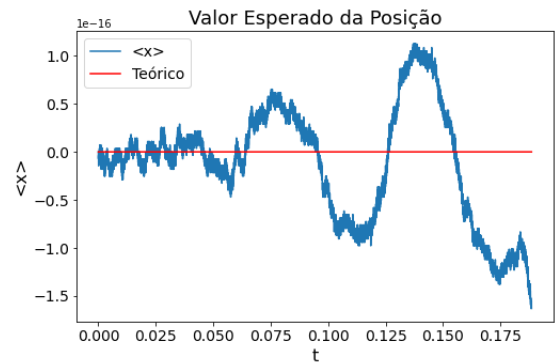
Para essa condição inicial (que é uma autofunção do hamiltoniano), é esperado que a evolução temporal ocorra de acordo com a equação (10). Como  $\psi_0$  é puramente real (todas as  $\psi_n$  são, vide equação (4)), a parte temporal garante que a amplitude da  $\Psi(x, t)$  seja alternada entre a parte real e a imaginária para todo  $x$ . Isso pode ser visto na figura 2. Note que, apesar das partes real e imaginária oscilarem, o valor de  $|\Psi(x, t)|^2$  é mantido constante para todo  $x$  e  $t$ . Isso nos ajuda a entender o porquê de o valor esperado da posição ser  $\langle x \rangle = 0$  para todo instante  $t$ , o que é reforçado pelas equações (12) e (13). Computacionalmente, o que ocorre é mostrado na figura 3.



**Figura 1:** Densidade de probabilidade da condição inicial no estado fundamental. Os parâmetros utilizados nessa simulação foram:  $m = 1 \text{ kg}$ ,  $\hbar = 1 \frac{\text{m}^2 \text{kg}}{\text{s}}$ ,  $\omega = 100 \text{ Hz}$ ,  $r = 0.075$  e  $dt = 0.00001$



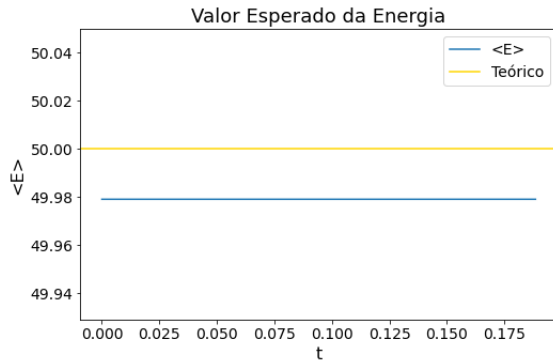
**Figura 2:** Partes real e imaginária de  $\Psi(0, t)$  com condição inicial  $\Psi(x, t = 0) = \psi_0(x)$ . Os parâmetros utilizados nessa simulação foram:  $m = 1 \text{ kg}$ ,  $\hbar = 1 \frac{\text{m}^2 \text{kg}}{\text{s}}$ ,  $\omega = 100 \text{ Hz}$ ,  $r = 0.075$  e  $dt = 0.00001$



**Figura 3:** Valor esperado de  $x$  (computacional e teórico calculado com a equação (12)) com condição inicial  $\Psi(x, t = 0) = \psi_0(x)$ . Os parâmetros utilizados nessa simulação foram:  $m = 1 \text{ kg}$ ,  $\hbar = 1 \frac{\text{m}^2 \text{kg}}{\text{s}}$ ,  $\omega = 100 \text{ Hz}$ ,  $r = 0.075$  e  $dt = 0.00001$

Na figura 3, é fácil ver que, apesar de não perfeitamente constante, as oscilações do valor esperado de  $x$  são puramente computacionais e tem amplitude da ordem de  $10^{-16}$ . É possível dizer que o valor esperado computacionalmente é essencialmente nulo, como o teórico.

Sabemos ainda, da teoria (equação (6)) que a energia do oscilador harmônico quântico é bem determinada. No estado fundamental, ela vale  $E = \frac{1}{2}\hbar\omega$ . A simulação realizada utilizou os valores  $\hbar = 1\text{m}^2\text{kg/s}$  e  $\omega = 100\text{Hz}$ , o que significa que a energia total teórica é  $E_T = 50\text{J}$ . Na figura 4 é possível ver que a energia calculada computacionalmente compatível com a esperada, com erro relativo de 0.04%.



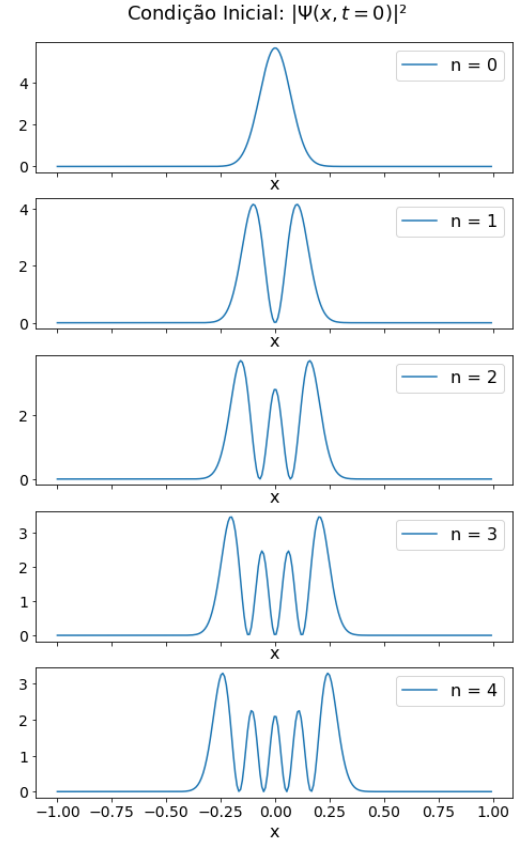
**Figura 4:** Valor esperado da energia em função do tempo para um sistema com condição inicial  $\Psi(x, t = 0) = \psi_0(x)$ . Os parâmetros utilizados nessa simulação foram:  $m = 1\text{kg}$ ,  $\hbar = 1\frac{\text{m}^2\text{kg}}{\text{s}}$ ,  $\omega = 100\text{Hz}$ ,  $r = 0.075$  e  $dt = 0.00001$

É relevante mencionar também que, apesar de  $|\Psi(x, t)|^2$  não mudar com o tempo, suas partes real e imaginária mudam (como mostrado na figura 2). Uma animação interessante dessa dinâmica pode ser encontrada aqui

## II. Condição inicial de nível energético superior

Aqui, estudamos o que ocorre quando a condição inicial é  $\Psi(x, t = 0) = \psi_n(x)$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Ao observar os resultados do caso em que a condição inicial do sistema era dada por  $\Psi(x, t = 0) = \psi_0(x)$ , algumas expectativas são criadas acerca dos resultados com condições iniciais mais energéticas. Por exemplo, com a equação (10), fica claro que o comportamento geral da função de onda será muito semelhante para qualquer autofunção da hamiltoniana. O que muda é, essencialmente, a forma e a amplitude da onda e das partes real e imaginária de  $\Psi$ . A função densidade de probabilidade  $|\Psi(x, t)|^2$  também não apresenta dependência temporal.

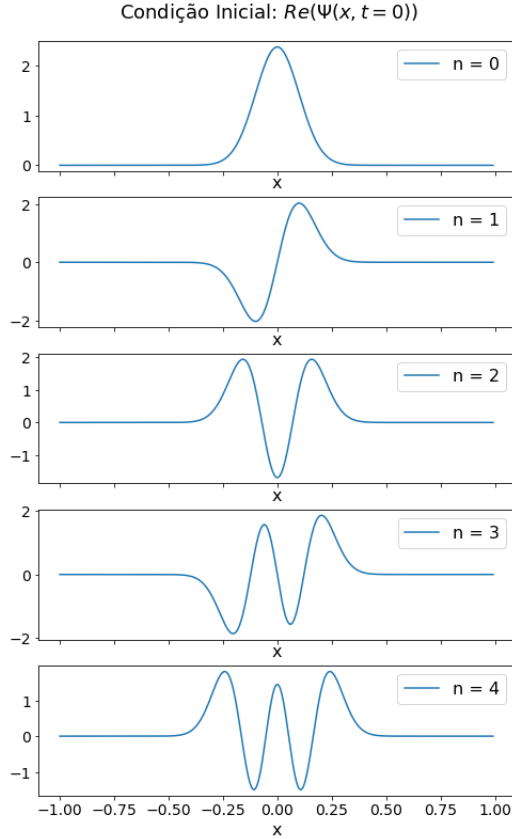
O que realmente deve apresentar mudanças entre os níveis de energia são os perfis das funções de onda: Partes real e módulo e os valores esperados da energia. O valor esperado da posição não deve mudar pois todas as autofunções do hamiltoniano têm valor esperado da posição nulo. Os perfis das funções de onda são mostrados nas figuras 5 e 6.



**Figura 5:** Densidade de probabilidade  $|\Psi(x, t = 0)|^2$  com condição inicial  $\Psi(x, t = 0) = \psi_n(x)$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Os parâmetros utilizados nessa simulação foram:  $m = 1\text{kg}$ ,  $\hbar = 1\frac{\text{m}^2\text{kg}}{\text{s}}$ ,  $\omega = 100\text{Hz}$ ,  $r = 0.075$  e  $dt = 0.00001$

Ainda é interessante observar o que ocorre com as energias esperadas. No caso em que a condição inicial era  $\Psi = \psi_0(x)$ , obtivemos uma energia muito próxima à prevista pela teoria. É razoável esperar que os resultados continuem coerentes com  $n$  crescente, mas é importante saber se o erro relativo aumenta ou diminui. As estimativas para as energias de diferentes níveis são mostradas na tabela 1. É possível concluir, após breve análise da tabela 1 que a precisão da estimativa da energia diminui com o aumento de  $n$ . Um motivo para isso poderia ser o fato de que, com o aumento energético do sistema, a simulação precisa de um aumento da precisão (redução dos passos  $dx$  e  $dt$ ) para

computar o aumento de energia de forma coerente. Outro ponto curioso é o fato de todas as estimativas computacionais resultarem energias estimadas inferiores à teórica. Esse fato precisa de estudo mais aprofundado para ser explorado.



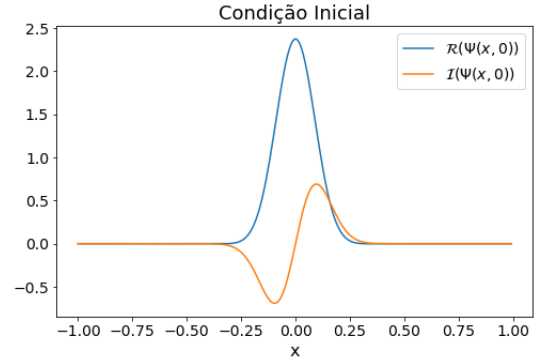
**Figura 6:** Parte real da função de onda para um sistema com condição inicial  $\Psi(x, t = 0) = \psi_n(x)$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Os parâmetros utilizados nessa simulação foram:  $m = 1\text{kg}$ ,  $\hbar = 1 \frac{\text{m}^2\text{kg}}{\text{s}}$ ,  $\omega = 100\text{Hz}$ ,  $r = 0.075$  e  $dt = 0.00001$

**Tabela 1:** Tabela de energias esperadas para diferentes níveis energéticos das funções de onda  $\Psi(x, t = 0) = \psi_n(x)$ . A unidade de medida energética padrão é o Joule. Os parâmetros utilizados na simulação foram:  $m = 1\text{kg}$ ,  $\hbar = 1 \frac{\text{m}^2\text{kg}}{\text{s}}$ ,  $\omega = 100\text{Hz}$ ,  $r = 0.075$  e  $dt = 0.00001$ .

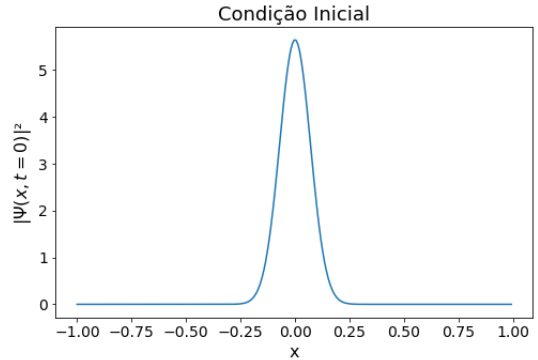
n	E	$\langle E \rangle$	Erro
0	50	49.98	0.04%
1	150	149.90	0.07%
2	250	249.73	0.11%
3	350	349.48	0.15%
4	450	449.15	0.19%

### III. Condição inicial alternativa

É ainda interessante considerar um caso onde a condição inicial não é uma autofunção  $\psi_n(x)$ . Aqui, consideramos  $\Psi(x, t = 0) = \psi_0 e^{ik_0 x}(x)$ , onde  $k_0$  é uma constante real. Nesse caso, é interessante mostrar o perfil completo da condição inicial do estado  $\Psi$  (figura 7). Essa figura permite ver que o que o fator  $e^{ik_0 x}$  faz é adicionar à condição inicial uma parte complexa. Isso é feito de forma que a amplitude da onda não é alterada. Isso significa que o perfil inicial de  $|\Psi(x, t = 0)|^2$  é o mesmo, como pode ser visto na figura 8.



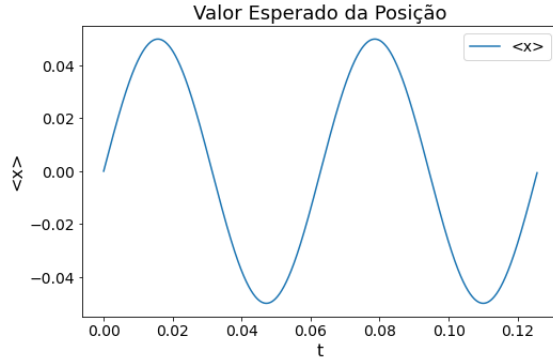
**Figura 7:** Partes real e imaginária da condição inicial  $\Psi(x, t = 0) = \psi_0(x)e^{ik_0 x}$ . Os parâmetros utilizados nessa simulação foram:  $k_0 = 5\text{m}^{-1}$ ,  $m = 1\text{kg}$ ,  $\hbar = 1 \frac{\text{m}^2\text{kg}}{\text{s}}$ ,  $\omega = 100\text{Hz}$ ,  $r = 0.075$  e  $dt = 0.00001$



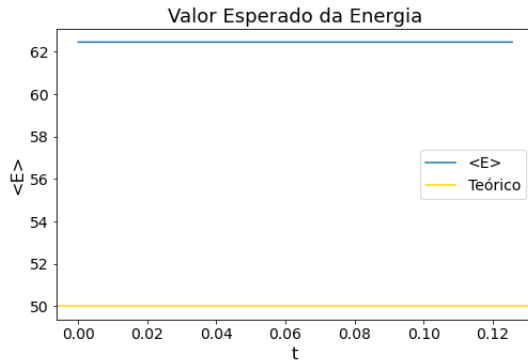
**Figura 8:** Densidade de Probabilidade inicial  $|\Psi(x, t = 0)|^2$  com condição inicial  $\Psi(x, t = 0) = \psi_0(x)e^{ik_0 x}$ . Os parâmetros utilizados nessa simulação foram:  $k_0 = 5\text{m}^{-1}$ ,  $m = 1\text{kg}$ ,  $\hbar = 1 \frac{\text{m}^2\text{kg}}{\text{s}}$ ,  $\omega = 100\text{Hz}$ ,  $r = 0.075$  e  $dt = 0.00001$

Apesar de o perfil inicial da densidade de probabilidade ser muito semelhante, sua evolução temporal não é! Como a condição inicial não é uma autofunção da hamiltoniana, não é possível dizer que sua evolução temporal é dada por

(10). Isso significa que os observáveis podem ter valores esperados diferentes das autofunções. Isso é evidente ao olhar as figuras 9 e 10. Lá vemos os valores esperados da posição  $\langle x \rangle(t)$  e da energia  $\langle E \rangle$ . O valor esperado da posição apresenta um comportamento curioso senoidal! Isso deve indicar que a densidade de probabilidade  $|\Psi(x, t)|^2$  "dança" para a direita e para a esquerda em sua evolução temporal. Essa dinâmica pode ser vista na figura 12

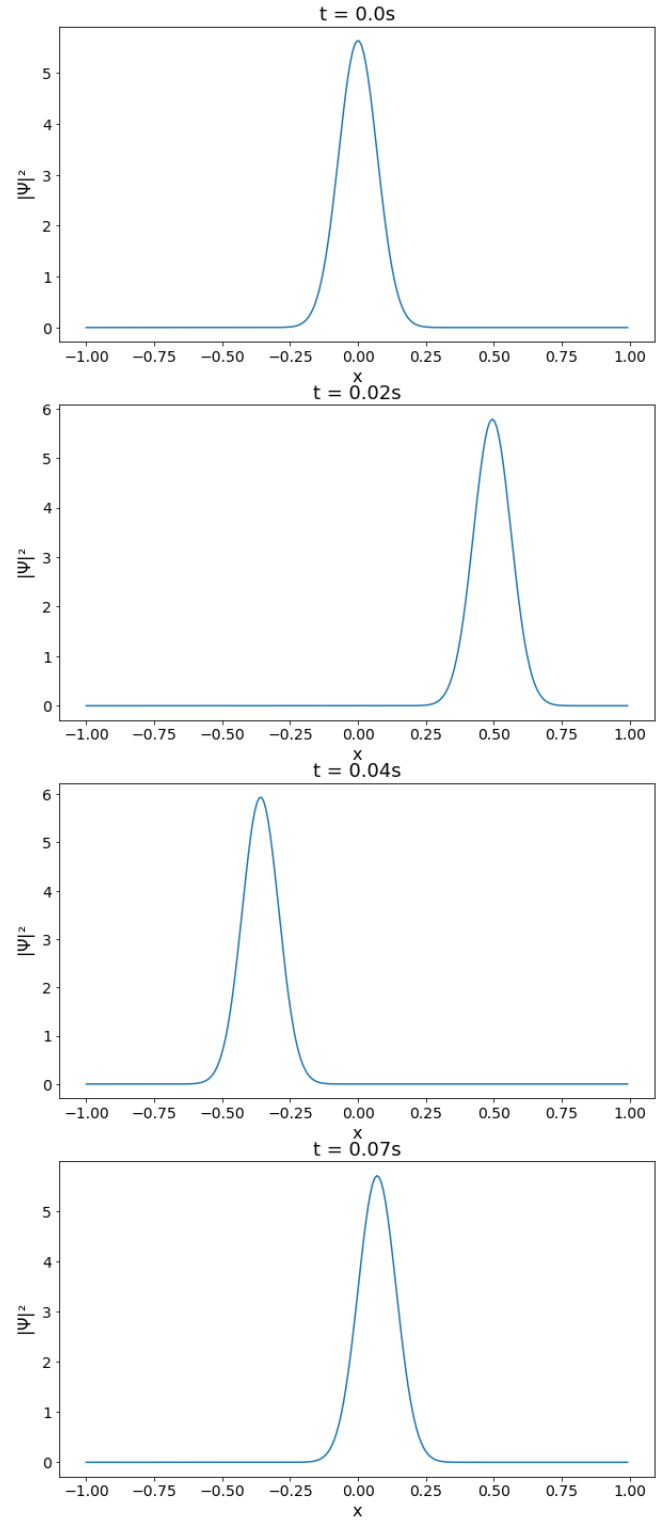


**Figura 9:** Valor esperado de  $x$  (computacional e teórico calculado com a equação (12)) com condição inicial  $\Psi(x, t=0) = \psi_0(x)e^{ik_0x}$ . Os parâmetros utilizados nessa simulação foram:  $k_0 = 5m^{-1}$ ,  $m = 1kg$ ,  $\hbar = 1 \frac{m^2 kg}{s}$ ,  $\omega = 100Hz$ ,  $r = 0.075$  e  $dt = 0.00001$



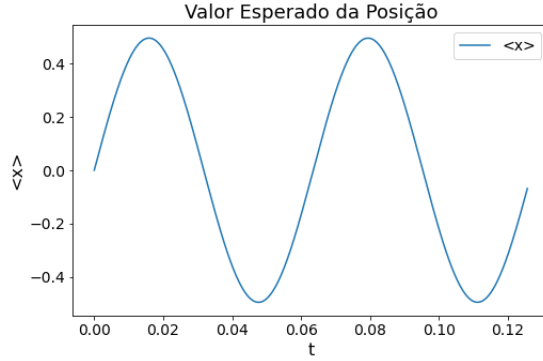
**Figura 10:** Valor esperado da energia com condição inicial  $\Psi(x, t=0) = \psi_0(x)e^{ik_0x}$ . Os parâmetros utilizados nessa simulação foram:  $k_0 = 5m^{-1}$ ,  $m = 1kg$ ,  $\hbar = 1 \frac{m^2 kg}{s}$ ,  $\omega = 100Hz$ ,  $r = 0.075$  e  $dt = 0.00001$

O valor encontrado para a energia esperada foi  $\langle E \rangle = 62.46J$ , que é superior ao esperado se a solução fosse uma autofunção do hamiltoniano. Ainda, após algumas simulações com diferentes valores de  $k_0$ , é possível observar que o valor da energia esperada é proporcional ao valor de  $k_0$ .



**Figura 11:** Função densidade de probabilidade em diferentes instantes de tempo com condição inicial  $\Psi(x, t=0) = \psi_0(x)e^{ik_0x}$ ,  $k_0 = 50$ . Os parâmetros utilizados nessa simulação foram:  $m = 1kg$ ,  $\hbar = 1 \frac{m^2 kg}{s}$ ,  $\omega = 100Hz$ ,  $r = 0.075$  e  $dt = 0.00001$

Essencialmente,  $k_0$  faz com que o valor esperado de  $x$  oscile mais intensamente. Isso pode ser observado na figura 11, onde  $K_0$  foi multiplicado por 10 com relação à simulação da figura 9  $k_0 = 50m^{-1}$  e a amplitude das oscilações de  $\langle x \rangle$  também foi multiplicada por 10.



**Figura 12:** Valor esperado da posição com condição inicial  $\Psi(x, t = 0) = \psi_0(x)e^{ik_0x}$ ,  $k_0 = 50$ . Os parâmetros utilizados nessa simulação foram:  $m = 1kg$ ,  $\hbar = 1\frac{m^2kg}{s}$ ,  $\omega = 100Hz$ ,  $r = 0.075$  e  $dt = 0.00001$

#### IV. Teorema de Ehrenfest

A equação (15) diz que a variação temporal do valor esperado da posição deve ser igual ao oposto do valor esperado da derivada espacial do potencial ao qual uma partícula está submetida. No caso do oscilador harmônico quântico, temos:

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

$$V'(x) = m\omega^2x$$

Portanto, o valor esperado da derivada do potencial harmônico é:

$$\langle V'(x) \rangle = m\omega^2 \langle x \rangle$$

Assim, pelo teorema de Ehrenfest, temos:

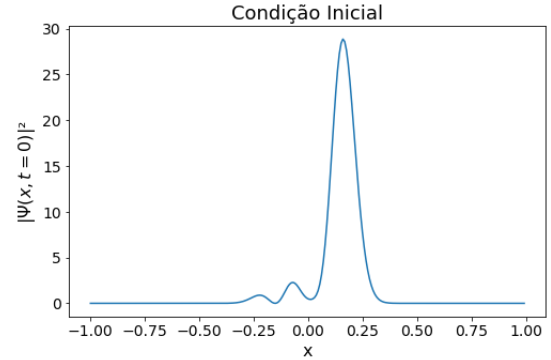
$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = -m\omega^2 \langle x \rangle$$

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle + \omega^2 \langle x \rangle = 0$$

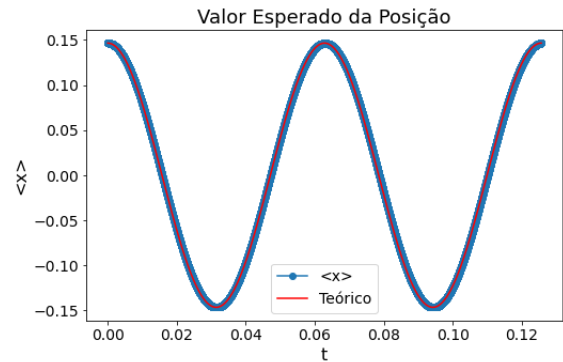
Essa equação diferencial é muito conhecida e indica que  $\langle x \rangle(t)$  deve realizar movimento oscilatório (senoidal) em torno de  $\langle x \rangle = 0m$ . Isso, é claro, para o caso em que a solução não é a trivial. O movimento efetivo da partícula dependerá das condições iniciais do problema.

Importante ressaltar que as soluções obtidas neste trabalho apresentam, para os casos não triviais, movimentos oscilatórios como o esperado.

Nas figuras 13 a 15 são mostrados os resultados para uma condição inicial dada por  $\Psi(x, t = 0s) = \sum_{n=0}^3 \psi_n(x)$ .



**Figura 13:** Densidade de probabilidade inicial da condição inicial no estado  $\Psi(x, t = 0s) = \sum_{n=0}^3 \psi_n(x)$ . Os parâmetros utilizados nessa simulação foram:  $m = 1kg$ ,  $\hbar = 1\frac{m^2kg}{s}$ ,  $\omega = 100Hz$ ,  $r = 0.075$  e  $dt = 0.00001$



**Figura 14:** Valor esperado da posição para a condição inicial no estado  $\Psi(x, t = 0s) = \sum_{n=0}^3 \psi_n(x)$ . Os parâmetros utilizados nessa simulação foram:  $m = 1kg$ ,  $\hbar = 1\frac{m^2kg}{s}$ ,  $\omega = 100Hz$ ,  $r = 0.075$  e  $dt = 0.00001$

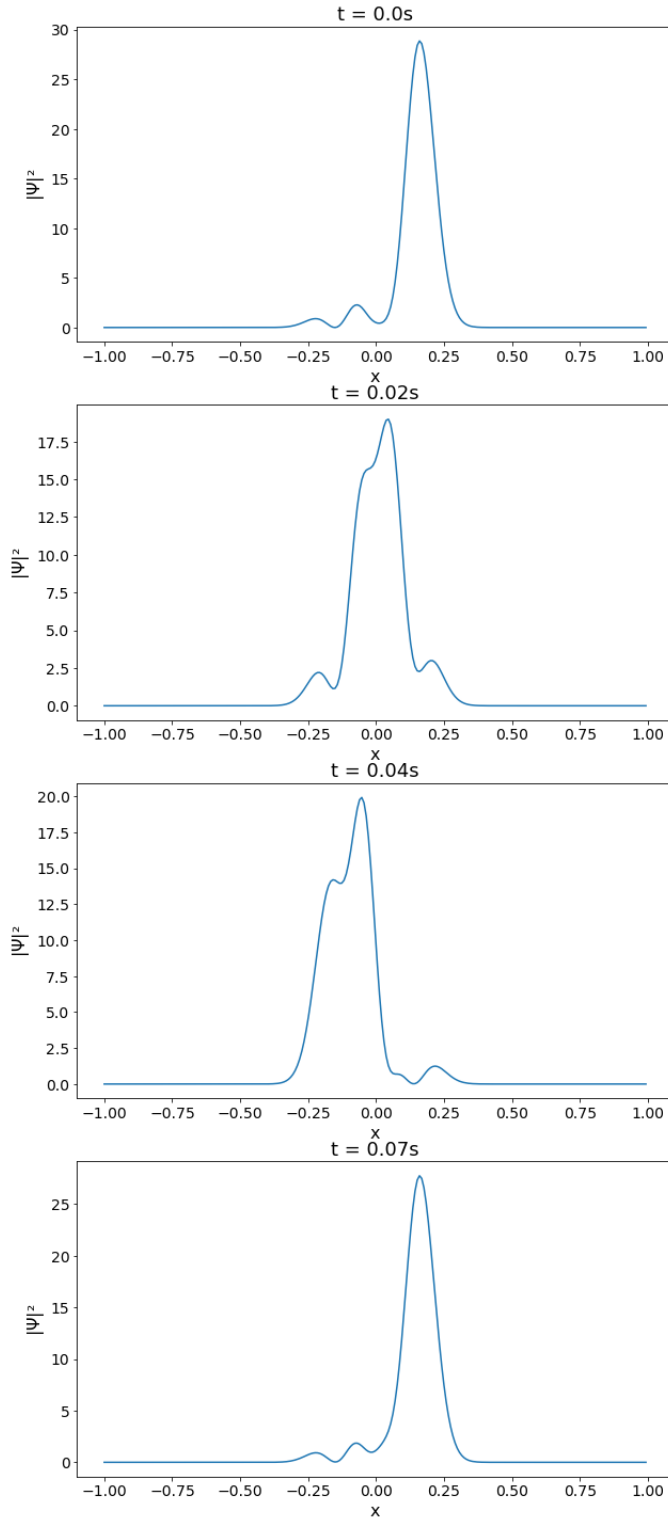


## IV. CONCLUSÃO

O oscilador harmônico é o sistema físico mais estudado em toda a física. Neste trabalho, foi proposto um estudo computacional para resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo para o oscilador harmônico quântico. O estudo foi realizado utilizando o método computacional Runge-Kutta de segunda ordem que se mostrou bastante competente em obter resultados muito coerentes com os esperados pela tão bem consolidada literatura.

## REFERÊNCIAS

- [1] David Jeffrey Griffiths and Lara Freitas. *Mecânica quântica*. Pearson Prentice Hall, 2011.
- [2] John Butcher. Runge-kutta methods. *Scholarpedia*, 2(9):3147, 2007.
- [3] Robert Johansson. Introduction to scientific computing in python, 2016.



**Figura 15:** Densidade de probabilidade da função de onda com condição inicial no estado  $\Psi(x, t = 0s) = \sum_{n=0}^3 \psi_n(x)$  para diferentes instantes de tempo. Os parâmetros utilizados nessa simulação foram:  $m = 1kg$ ,  $\hbar = 1 \frac{m^2 kg}{s}$ ,  $\omega = 100Hz$ ,  $r = 0.075$  e  $dt = 0.00001$

## A. MANUAL DO USUÁRIO

O código *GuilhermeDamacenaDeCastro\_Projeto4.py* é de bastante simples utilização e será descrito a seguir.

Tudo que o usuário precisa fazer, essencialmente, é definir as condições iniciais. O usuário só deve manipular variáveis específicas sinalizadas com um comentário iniciado em: *#USUARIO*, seguido de instruções. O fim do bloco "editável" é também sinalizado com uma sequência de hashtags: #####

Os trechos editáveis são mostrados abaixo.

```
# USUÁRIO - DEFINA AS CONSTANTES INICIAIS

dt = 0.00001 # Passo de tempo
r = 0.075 # Parametro do RK2
L = 1 # metade do tamanho da caixa

w = 100 #frequência em hz

tf = 2*(2*np.pi/w) # Tempo total
m = 1 # massa kg
hbar = 1 # constante de planck reduzida

#####
```

**Figura 16:** Trecho 1: Adição das constantes iniciais.

```
# USUÁRIO - DEFINA AS CONDIÇÕES INICIAIS PSIO
niveis = np.array([0,1,2,3])
coeficientes = np.array([1,1,1,1])
k0 = 50

# ABAIXO, TROQUE A LINHA COMENTADA CASO DESEJE UTILIZAR COMO CONDIÇÃO INICIAL
# A PSI_ALTERNATIVA COM O TERMO EXPONENCIAL
Psi[:, 0] = make_Psi(niveis,coeficientes,x)

#Psi[:,0] = psi_n(0,x)*np.exp(1j*k0*x)

#####
```

**Figura 17:** Trecho 2: Escolha das condições iniciais.

No trecho 2, o usuário deve escolher se deseja usar uma condição inicial do tipo alternativo ou usual (equação (7)). Isso é feito através da troca da linha comentada que começa em *Psi[:,0]*. A lista *niveis* deve ser preenchida com os níveis energéticos das autofunções que o usuário deseja que componham a condição inicial. A lista *coeficientes* é preenchida com os coeficientes multiplicativos  $C_n$  dessas autofunções. É importante que ambas as listas tenham mesmo tamanho.