FÍSICA COMPUTACIONAL II

QUESTÃO 5 DA TERCEIRA AVALIAÇÃO - VALOR: 1,2 PT - PRAZO: 26/02

A equação de Schrödinger e o método espectral

(Dica: mesmo que você não tenha visto a equação de Schrödinger ainda, o que deve ser feito nesta questão não é complicado. Na segunda página são dadas instruções diretas do que deve ser feito.)

Este exercício usa o método espectral para resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

para uma partícula em uma dimensão dentro de uma caixa de comprimento L com paredes impenetráveis. A função de onda neste tipo de caixa necessariamente vai a zero nas paredes e portanto uma possível solução (não normalizada) da equação é

$$\psi_k(x,t) = \sin\left(\frac{\pi k x}{L}\right) \mathrm{e}^{\mathrm{i}Et/\hbar},$$

onde a energia E pode ser achada substituindo esta função de onda na equação de Schrödinger, fornecendo

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2 k^2}{2ML^2}.$$

Assim como a corda vibrante que vimos em aula, nós podemos escrever a solução completa como uma combinação linear de diversas soluções individuais, as quais na grade de pontos $x_n = nL/N$ assume o valor

$$\psi(x_n,t) = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N-1} b_k \sin\left(\frac{\pi k n}{N}\right) \exp\left(\mathrm{i}\frac{\pi^2\hbar k^2}{2ML^2}t\right),$$

onde os b_k são alguns dos coeficientes (possivelmente complexos) que especificam a forma exata da função de onda e o fator $1/N$ é opcional mas conveniente.

Uma vez que a equação de Schrödinger é de primeira ordem no tempo (diferente da equação de onda), nós precisamos apenas de uma única condição inicial do valor de $\psi(x,t)$ para especificar os coeficientes b_k. Entretanto, como os coeficientes em geral são complexos, nós precisamos calcular tanto a parte real como a parte imaginária de cada coeficiente (diferente do $\phi(x_n,t)$ da equação de onda, a função de onda $\psi(x_n,t)$ é em geral complexa. Vamos ter N condições iniciais especificando sua parte real e N condições iniciais especificando sua parte imaginária.)

Nós vamos considerar aqui um elétron (de massa $M = 9.109 \times 10^{-31}$ kg) em uma caixa de comprimento $L = 10^{-8}$ m. No tempo $t = 0$ a função de onda do elétron tem a forma

$$\psi(x,0) = \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\kappa x},$$

onde

$$x_0 = \frac{L}{2}, \qquad \sigma = 1\times 10^{-10}\,\mathrm{m}, \qquad \kappa = 5\times 10^{10}\,\mathrm{m}^{-1},$$

e $\psi = 0$ nas paredes em $x = 0$ e $x = L$.

a) Escreva um programa para calcular os valores dos coeficientes b_k, os quais por conveniência podem ser quebrados em uma parte real e uma imaginária como $b_k = \alpha_k + i\eta_k$. Divida a caixa em $N = 1000$ fatias e crie dois vetores contendo as partes reais e imaginárias de $\psi(x_n, 0)$ em cada ponto do grid. Faça uma transformada discreta dos senos para transformar cada vetor separadamente e em seguida calcule os valores de α_k e η_k para todos os $k = 1 \ldots N-1$. (dica: α_k é o conjunto obtido fazendo a transformada dos senos da parte real do $\psi(x, 0)$ dado; η_k é o conjunto obtido fazendo a transformada dos senos da parte imaginária do $\psi(x, 0)$ dado).

   Para realizar as transformadas discretas dos senos, você pode usar a função de transformada rápida `dst` do pacote `dcst`, que pode ser encontrado no SIGAA. A função recebe um vetor com N números reais e retorna a transformada discreta dos senos como um outro vetor com N números.

b) Colocando $b_k = \alpha_k + i\eta_k$ na solução acima e pegando a parte real nós obtemos

$$\mathrm{Re}\, \psi(x_n, t) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N-1} \left[\alpha_k \cos\left(\frac{\pi^2 \hbar k^2}{2ML^2} t \right) - \eta_k \sin\left(\frac{\pi^2 \hbar k^2}{2ML^2} t \right) \right] \sin\left(\frac{\pi k n}{N} \right)$$

   para a parte real da função de onda. Esta é uma transformada inversa dos senos com coeficientes iguais as quantidades entre colchetes. Extenda seu programa para calcular a parte real da função de onda $\psi(x, t)$ em um tempo arbitrário t usando esta fórmula e a função de transformada inversa `idst`, também do pacote `dcst`. Teste seu programa fazendo um gráfico da função de onda no tempo $t = 10^{-16}$ s. (Dica: se preferir, você pode calcular a soma acima explicitamente).

c) Plote em um mesmo gráfico o valor da parte real da função de onda em cinco instantes: $t = 2 * 10^{-16}$ s, $t = 4 * 10^{-16}$ s, $t = 6 * 10^{-16}$ s, $t = 8 * 10^{-16}$ s e $t = 10^{-15}$ s. Descreva o que você observa.

d) (Se você responder até o item acima, obterá o valor integral da questão. Este item vale +0,3 pt extra) Extenda seu programa ainda mais para fazer uma animação da função de onda evoluindo no tempo. Um intervalo de tempo razoável entre cada quadro da animação é de cerca de 10^{-18} s.