

PROJETO 3:
EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER EM UMA DIMENSÃO

Me. Gubio Gomes De Lima.

07/10/2022

1 Introdução

Problema : Encontrar as energia e funções de onda da equação de Schrodinger em uma dimensão.
Objetivo específico:

1. Plotar as funções de onda para os níveis $n=0,1,2$.
2. Plotar os níveis de energia para correspondente.

Onde consideramos as seguintes condições iniciais :

$$\Psi(x \equiv \pm\infty) \approx 0$$

A equação de Schrödinger em uma dimensão, com a aproximação da massa da partícula e a constante de planck sendo 1 :

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + V(x)\phi(x) \equiv \epsilon \phi(x) \quad (1)$$

onde ϵ nível de energia e $V(x)$ é o potencial,dado por :

$$V(x) \equiv 6\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{\cosh(x)^2}\right) \quad (2)$$

Sabemos também que a equação de Stum-Lioville :

$$[p(x)y'(x)]' + q(x)y(x) \equiv s(x) \quad (3)$$

Para o caso específico do algoritmo de NUMEROV $p(x)=1$, obtendo :

$$y(x)'' + q(x)y(x) \equiv s(x) \quad (4)$$

Algoritmo de NUMEROV:

$$c_{i+1}y_{i+1} + c_{i-1}y_{i-1} \equiv c_i y_i + d_i + O(h^6) \quad (5)$$

com as constante:

$$c_{i+1} \equiv 1 + \frac{h^1}{12}q_{i+1}$$

$$c_{i-1} \equiv 1 + \frac{h^1}{12}q_{i-1}$$

$$c_i \equiv 2 - \frac{5h^1}{6}q_i$$

$$d_i \equiv \frac{h^2}{12}(s_{i+1} + 10s_i + s_{i-1})$$

Podemos rescrever a equação (1), para utilizar o algoritmo como:

$$\phi(x)'' + 2(\epsilon - V(x))\phi(x) \equiv 0 \quad (6)$$

Comparando (3) com (4), notamos que $y(x) = \phi(x)$, $q(x) = 2(\epsilon - V(x))$ e $s(x) = 0$

2 Descrição do programa

Com o objetivo de resolver o problemas, vamos utilizar a linguagem de programação C++ e os métodos numéricos ensinados em sala de aula.

No script a seguir usaremos o algoritmo de Numerov para integrar do $+\infty$ infinito, que nesse caso é $+10$ até o ponto de retorno denominado x_d , definido como o ponto onde a energia é igual ao potencial. Nesse ponto de retorno usaremos a condição de continuidade da função de onda e sua derivada para escolher os valores corretos de energia, pois fisicamente :

$$\phi(x)_{left} \equiv \phi(x)_{right}$$

$$\phi(x)'_{left} \equiv \phi(x)'_{right}$$

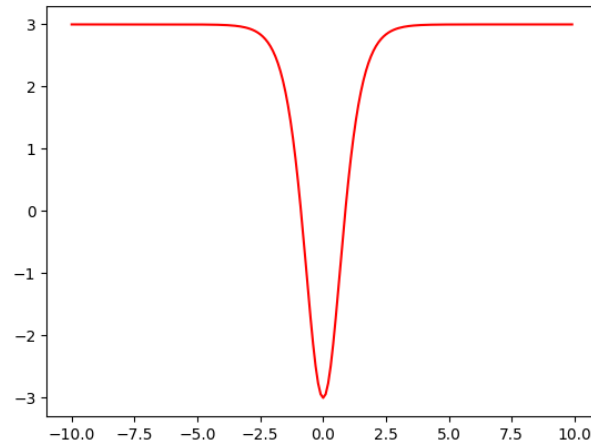
No algoritmo podemos implementar a derivada usando a formula de 3 pontos. O primeiro passo no script foi definir todas as funções que serão utilizadas.

```

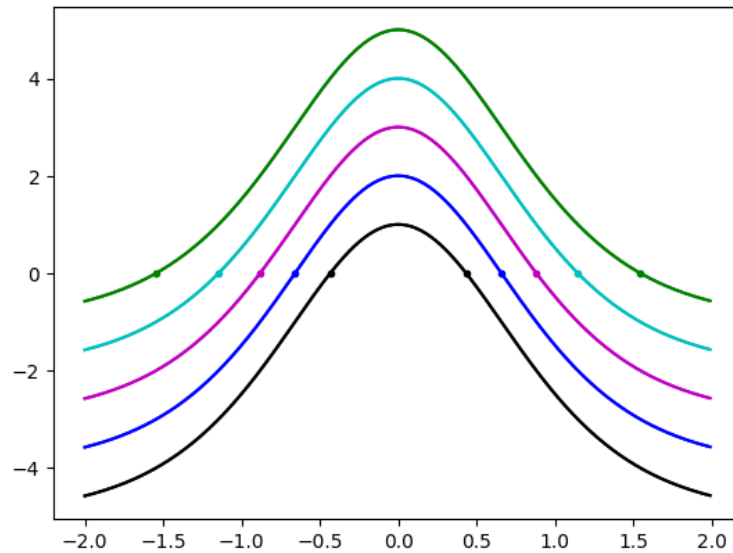
8 > double V(double x) ...
12 > double F(double x,double E) ...
16 > double c_(double x,double h,double E) ...
20 > double c_i(double x,double h,double E) ...
24
25 > double turning_point(double E, double xii,double hh) ...
44
45 > double wave(double E,double h) ...
78 > double d_wave(double E,double h) ...

```

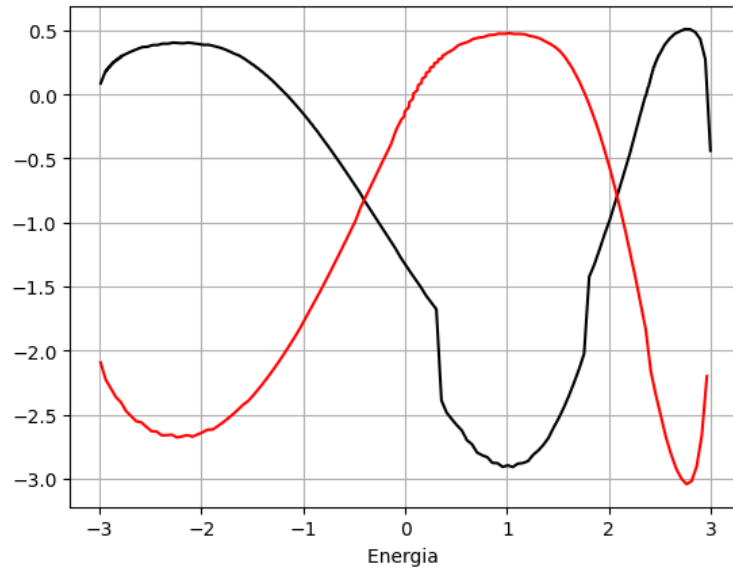
Como mostrado a cima, foi definido 7 funções, a primeira foi definido como $V(x)$ que representa o potencial utilizado :



A segunda função representa o $q(x)$, era é útil para encontramos o pontos de retorno, para encontrar os pontos de retorno definimos a 5ª função, que realiza uma busca direta, Veja uma ilustração a seguir para níveis de energia quaisquer.

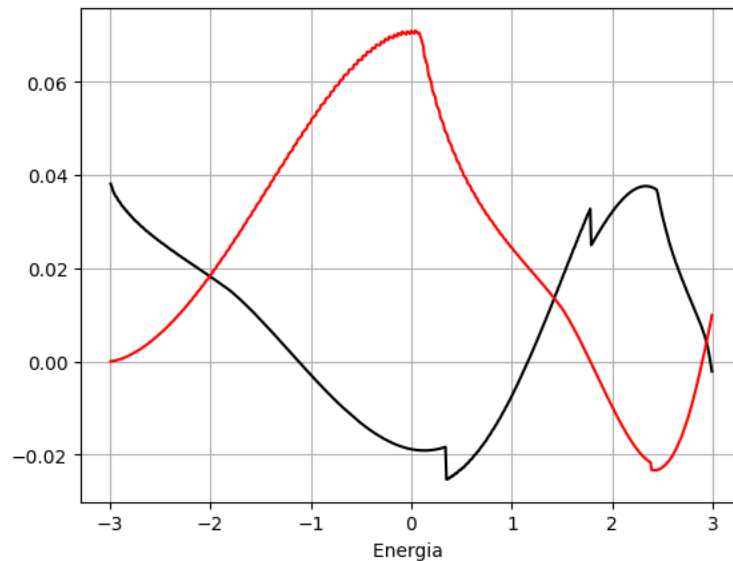


A 3ª e 4ª função faz o papel da constante do método de Numerov apresentado na eq.(5). A 6ª(wave) função foi construída para retorna o valor da diferença entre a função de onda vida da direita e esquerda, podemos visualizar o comportamento dela a seguir :



A linha preta é referente a diferença das funções de onda no ponto de retorno, para diferentes valores de energia, para o primeiro passo da função ser positivo. Note que no método de número, precisamos de dois passos para inicializarmos a calculo, nesse caso a condição de contorno nos dias que a função em \pm infinito é zero, então temos o passo 0, o próximo passo é escolhido um valor pequeno como 0.001, a curva preta é para quando o passo 1 é positivo e o vermelha para quando o passo é negativo. Essas duas situações vão nos fornecer outros valores diferentes, em específico sabemos que para os casos de nível de energia ímpar precisamos ter que o passo 1 seja negativo e para os níveis de energia pares podemos usar o caso positivo.

Esse gráfico é interessante porque nos mostra, que quando a curva passa em zero nos indica um possível autovalor de energia. Para confirmar se esse valor é um autovalor olharemos a diferença entre as derivadas no ponto de retorno, para tanto definimos a 7ª função, podemos visualizar o comportamento dessa função.



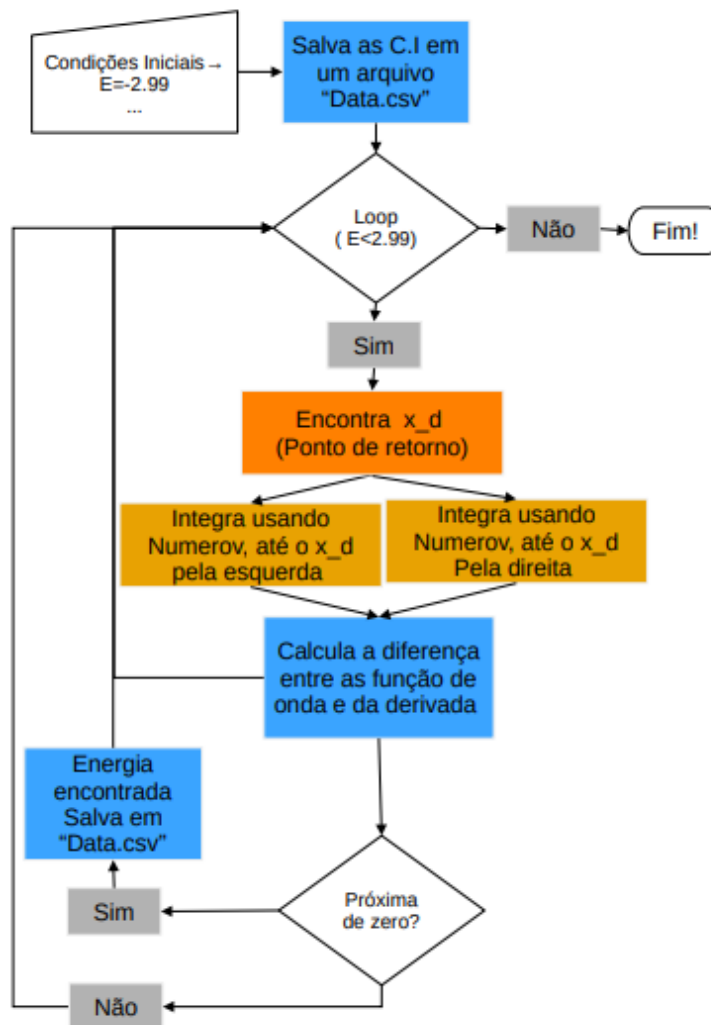
Com todas essas informações foi utilizado novamente o método de busca direta para encontrar os zeros das duas funções, caso as duas funções sejam zero para o mesmo valor de energia, então temos um autovalor de energia do nosso sistema. Todo esse processo é realizado dentro de um loop que encerra quando varrer todos os valores de energia.

```

120 /////////////////////////////////////////////////// PROCURANDO AS ENERGIAS ///////////////////////////////////////////////////
121 delta1 = 0.01; // variação inicial , criada para otimizar a procura
122 delta = delta1; // variação que pode ser ajustada para obter uma melhor a
123 E = -2.99; // Energia inicial da busca.
124 ///////////////////////////////////////////////////
125 while (E<2.99)
126 {
127 // Vamos realizar um busca direta //
128 dif1 = wave(E,h);
129 Dif1 = d_wave(E,h);
130 E = E + delta ;
131 dif2 = wave(E,h);
132 Dif2 = d_wave(E,h);
133 ///////////////////////////////////////////////////
134 // Condiçionais //
135 > if( (abs(dif1*dif2) < 0.000001) && ( abs(Dif1*Dif2) < 0.000000000000001 ) ) ...
143 > if( ( dif1*dif2 < 0 ) && ( delta > 0.00001 ) && ( Dif1*Dif2 < 0 ) ) ...
150 }

```

Fluxograma:

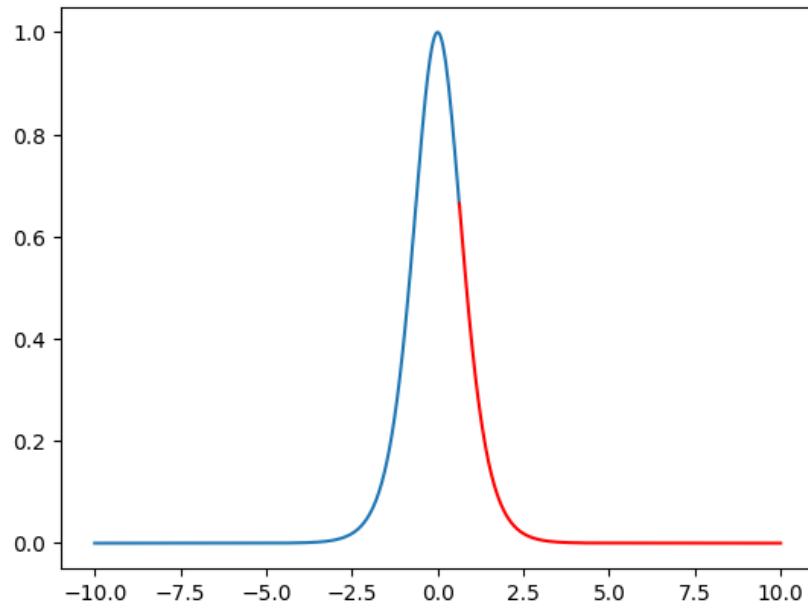


3 Resultados

Com os valores de energia encontrados, usaremos o python para plotar:

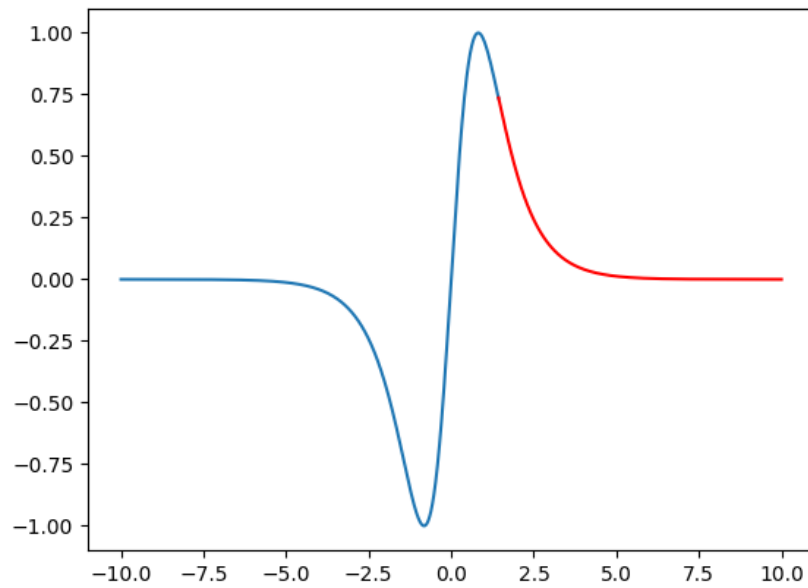
3.1 Caso com $n = 0$

Para o caso com $n = 0$ a energia obtida foi $E = -1.12069$



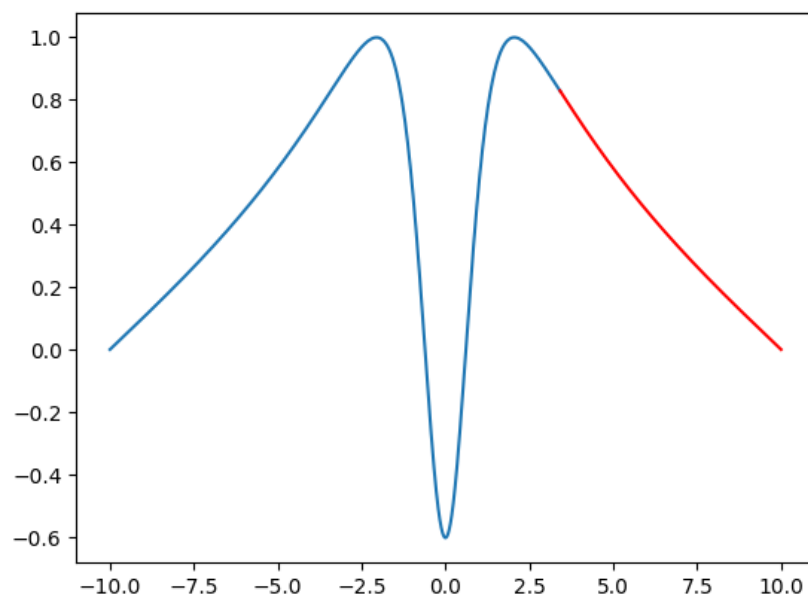
3.2 Caso com $n = 1$

Para o caso com $n = 1$ a energia obtida foi $E = 1.780910$



3.3 Caso com $n = 2$

Para o caso com $n = 2$ a energia obtida foi $E = 2.9740199$



Potencial com os níveis de energia :

