

# Análise das principais características do oscilador harmônico quântico 1D através de simulações numéricas da função de onda.

LUCAS DE PAULA OLIVEIRA, 11222179  
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

## Resumo

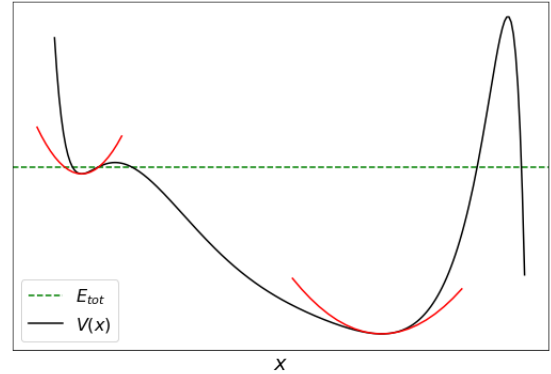
*Tendo em vista o contexto no qual o oscilador harmônico se insere e sua vasta gama de aplicações, o presente trabalho se propõe a estudar a dinâmica da função de onda  $\Psi(x, t)$  correspondente ao sistema de uma partícula sujeita a um potencial unidimensional de tipo harmônico. Esse estudo se deu com base na resolução numérica da equação de Schrödinger completa por meio do algoritmo RK-2. A consistência das soluções numéricas com relação aos resultados teóricos foi avaliada através da análise do valor esperado de energia  $\langle E \rangle$  para diferentes condições iniciais e, além disso, através de uma verificação direta de manifestação do Teorema de Ehrenfest para a variável dinâmica  $\langle x \rangle$ . Todos os resultados obtidos se mostraram consistentes, apresentando graus de convergência bastante aceitáveis tanto dentro do script de simulação propriamente dito quanto com respeito aos resultados esperados/previsitos pelo modelo teórico.*

## 1. INTRODUÇÃO

*"The career of a young theoretical physicist consists of treating the harmonic oscillator in ever-increasing levels of abstraction."*

Atribuída ao ilustre cientista estadunidense Sidney Coleman, a frase anterior faz uma sátira à inumerável quantidade de vezes em que o problema do oscilador harmônico aparece ao longo da carreira de um físico. De fato, o oscilador harmônico é um dos problemas mais fundamentais da física, e aparece naturalmente na análise de muitas situações de grande interesse não só científico, mas também prático.

Classicamente, qualquer sistema cuja partícula / corpo em estudo esteja sujeito a uma *força restauradora* apresentará um movimento oscilatório de tipo harmônico. A função energia potencial do sistema (que, desse momento em diante, será chamada simplesmente de *potencial* e será denotada por  $V$ ) pode ser uma função qualquer. Desde que a energia total associada ao objeto em questão seja suficiente para mantê-lo nas proximidades de uma região de *poço de potencial*, sempre haverá uma força restauradora presente e, portanto, o movimento resultante será oscilatório em torno da posição de equilíbrio.



**Figura 1:** Exemplo genérico de um potencial unidimensional com dois mínimos locais e suas respectivas aproximações parabólicas. Nesse exemplo em específico a partícula com energia  $E_{tot}$  pode oscilar harmonicamente em torno de qualquer um dos potenciais parabólicos ilustrados (a depender das condições iniciais do problema).

Dentro do contexto da *mecânica clássica* as noções de *força* se aplicam não só ao problema do oscilador harmônico, mas também a todos os demais problemas de interesse. Elas constituem a base da *mecânica newtoniana*, e a determinação explícita dessas quantidades vetoriais representa o ponto de partida para o tratamento analítico e matemático de praticamente todos os sistemas clássicos.

Contudo, à medida que a ordem de grandeza do sistema em estudo decresce, chegando eventualmente nas escalas da *constante de Planck*, a mecânica newtoniana deixa de valer e, portanto, a noção de força deixa de ser significativa. Dentro desse regime de escala a *mecânica quântica*

entra em jogo, e o problema do oscilador harmônico (que será chamado a partir desse ponto de *oscilador harmônico quântico*) deve passar a ser analisado unicamente pelo ponto de vista da função potencial  $V$  [2] dada por:

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

na qual  $m$  representa a massa da partícula em estudo e  $\omega$  a sua frequência de oscilação no sistema (que depende exclusivamente da energia total  $E$ ).

Da mesma maneira, a noção de posição também quebra nesse limite de escala, e o comportamento da partícula deve passar a ser descrito por uma *função de onda*  $\Psi(x, t)$ , cuja dinâmica é dada pela *equação de Schrodinger* [4]

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}(x, t) + V(x, t) \cdot \Psi(x, t) = E \cdot \Psi(x, t) = \mathcal{H}\Psi(x, t) \quad (2)$$

Esse é o formalismo que deve ser aplicado no estudo de todo e qualquer oscilador harmônico quântico, i.e., todo oscilador harmônico cuja escala de dimensão típica seja pequena o suficiente para que o comportamento ondulatório das partículas no sistema se torne relevante. Alguns exemplos típicos de problemas que devem ser estudados com base na dinâmica imposta pela equação de Schrodinger e que se enquadram na definição de osciladores harmônicos são: o problema do movimento vibracional de átomos em moléculas diatômicas, o problema da eletrodinâmica de sistemas quânticos com característica vibracional de ondas eletromagnéticas, o problema de análise das propriedades magnéticas de sólidos (o qual envolve movimentos vibracionais no que se refere à orientação dos núcleos), entre outros [1].

Uma vez que o potencial do oscilador harmônico (1) é uma função apenas do espaço, a equação de Schrodinger para esse sistema pode ser escrita simplesmente como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}(x, t) + V(x) \cdot \Psi(x, t) = E \cdot \Psi(x, t) = \mathcal{H}\Psi(x, t) \quad (3)$$

Uma tentativa de resolução da equação (3) via *método de separação de variáveis* irá gerar soluções que costumam ser chamadas na literatura de *estados estacionários* [1]. Os estados estacionários têm como principal característica uma função de onda  $\Psi(x, t)$  na forma:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (4)$$

na qual a parte espacial  $\psi$  é solução da chamada *equação de Schrodinger independente do tempo*:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2}(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (5)$$

A resolução analítica exata dessa equação para o potencial (1) é muito trabalhosa e foge às intenções do presente trabalho. Apesar disso, é importante registrar que a equação (5) admite um conjunto infinito, *porém discreto*, de energias para as quais a função espacial  $\psi$  (e, conseqüentemente, para as quais a função de onda  $\Psi$ ) é finita e normalizável [2]. Essas energias e suas correspondentes funções espaciais  $\psi$  (também chamadas de *auto-funções do operador  $\mathcal{H}$* ) são apresentadas a seguir. [2]

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} \quad (6)$$

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (7)$$

nas quais  $n = 1, 2, 3, \dots$ ;  $\xi$  é uma variável auxiliar definida por

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (8)$$

e  $H_n$  são as funções especiais chamadas *polinômios de Hermite*, que aparecem naturalmente ao longo da resolução da equação 5.

Esse conjunto de auto-funções define uma *base ortonormal completa* para o espaço de funções que solucionam a equação de Schrodinger (5) associada ao potencial harmônico. Essa base de funções  $\psi_n$ , por sua vez, define também uma base ortonormal completa  $\Psi_n$  de funções de onda associadas a cada um dos auto-estados de energia do sistema.

Isso significa que a função de onda de uma partícula sujeita ao potencial harmônico e *que esteja em um estado quântico qualquer* pode ser sempre escrita como uma combinação linear das funções de base  $\Psi_n$ .

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \Psi_n(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \quad (9)$$

Na equação (9) acima, os coeficientes  $c_n$  (que podem ser tanto complexos quanto reais) devem ser determinados com o auxílio da condição inicial do problema e das relações de ortogonalidade das funções  $\psi_n$ , as quais estão associadas, respectivamente, às relações de ortogonalidade dos polinômios de Hermite  $H_n$ . Não cabe ao escopo desse trabalho uma discussão aprofundada sobre a determinação desses coeficientes na construção de um sistema quântico sujeito ao potencial harmônico. Apesar

disso, é importante salientar que, se este sistema for preparado de tal maneira que  $\Psi(x, t = 0) = \psi_m(x)$ , ou seja, se a função de onda inicial da partícula for equivalente a uma das auto-funções da base, então  $c_n = 0 \forall n \neq m$  e  $c_m = 1$ . Desse modo, tem-se:

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

Portanto, nesses casos particulares, a função de onda da partícula no sistema é descrita pela relação (10), e o valor esperado da energia é simplesmente o valor da energia correspondente ao estado  $m$  escolhido na condição inicial.

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \mathcal{H} \Psi(x, t) dx \\ &= E_m \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx \\ &= E_m \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = E_m \end{aligned} \quad (11)$$

Conforme apresentado ao longo dos parágrafos anteriores, a solução analítica completa do problema do oscilador harmônico quântico (o qual envolve a resolução da equação (5)) não será abordada. Ao invés disso, a equação (3) será resolvida numericamente através de um script computacional construído com base no *algoritmo de Runge-Kutta de 2ª ordem (RK-2)*. Desse modo será possível estudar as principais propriedades e características do oscilador harmônico quântico por meio de simulações numéricas de diferentes casos de interesse, tendo sempre como base de referência os resultados teóricos apresentados ao longo das equações (4), (6) e (7).

## 2. ALGORITMO DE RESOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE SCHRODINGER COMPLETA

Primeiramente é importante destacar que, por simplicidade, as constantes principais  $\hbar$  e  $m$  (constante de Planck reduzida e massa da partícula no sistema, respectivamente) serão ambas tratadas como sendo iguais a 1. Desse ponto em diante essas unidades de medida serão chamadas de *unidades características*, e serão denotadas por [u.c.].

Em unidades características, portanto, a equação (3) passa a ser dada por:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \Psi}{dx^2}(x, t) + V(x) \cdot \Psi(x, t) = E \cdot \Psi(x, t) \quad (12)$$

A função de onda  $\Psi$ , por sua vez, pode ser escrita em termos de uma parte real e de uma parte imaginária.

$$\Psi(x, t) = R(x, t) + iI(x, t) \quad (13)$$

As funções  $R$  e  $I$  possuem também equações diferenciais parciais associadas uma vez que  $\Psi$  satisfaz a equação de Schrodinger completa. A aplicação de (13) em (12) resulta no seguinte sistema de equações diferenciais parciais acopladas [5]:

$$\begin{cases} \frac{\partial R}{\partial t}(x, t) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 I}{\partial x^2}(x, t) + V(x)I(x, t) \\ \frac{\partial I}{\partial t}(x, t) = +\frac{1}{2} \frac{\partial^2 R}{\partial x^2}(x, t) - V(x)R(x, t) \end{cases} \quad (14)$$

onde as relações satisfeitas pelas partes real e imaginária de  $\Psi$  já foram convenientemente reescritas de tal maneira a facilitar a aplicação do método RK-2.

Vale ressaltar que o algoritmo RK-2 é responsável somente por efetuar a *atualização temporal das funções  $R$  e  $I$  a cada ponto*. Ou seja, ele é responsável somente por fornecer os valores  $R(x, t + dt)$  e  $I(x, t + dt)$  com base nas derivadas temporais apresentadas em (14). As derivadas espaciais de 2ª ordem presentes devem ser determinadas numericamente considerando o *procedimento simétrico de derivação*; justamente o procedimento de derivação que fornece os menores erros de cálculo numérico.

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 R}{\partial x^2}(x, t) = \frac{R(x+dx, t) - 2R(x, t) + R(x-dx, t)}{dx^2} \\ \frac{\partial^2 I}{\partial x^2}(x, t) = \frac{I(x+dx, t) - 2I(x, t) + I(x-dx, t)}{dx^2} \end{cases} \quad (15)$$

Utilizando as relações (14) e (15), o algoritmo RK-2 resulta:

$$\begin{cases} R(x, t + dt) = R(x, t) + k_2^R \\ I(x, t + dt) = I(x, t) + k_2^I \end{cases} \quad (16)$$

sendo  $k_2^R$  e  $k_2^I$  variáveis auxiliares definidas como:

$$\begin{cases} k_2^R = \frac{\partial R}{\partial t}(x, t + dt/2) \cdot dt = \\ \quad = \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 I_{1/2}}{\partial x^2}(x) + V(x)I_{1/2}(x) \right] \cdot dt \\ k_2^I = \frac{\partial I}{\partial t}(x, t + dt/2) \cdot dt = \\ \quad = \left[ \frac{1}{2} \frac{\partial^2 R_{1/2}}{\partial x^2}(x) - V(x)R_{1/2}(x) \right] \cdot dt \end{cases} \quad (17)$$

com  $R_{1/2}(x)$  e  $I_{1/2}(x)$  (chamadas *variáveis a meio-passo*) dadas por:

$$\begin{cases} R_{1/2}(x) = R(x, t + dt/2) = R(x, t) + k_1^R/2 \\ I_{1/2} = I(x, t + dt/2) = I(x, t) + k_1^I/2 \end{cases} \quad (18)$$

As variáveis  $k_1^R$  e  $k_1^I$  são também variáveis auxiliares, e são dadas pelas relações:

$$\begin{cases} k_1^R = \frac{\partial R}{\partial t}(x, t) \cdot dt = \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 I}{\partial x^2}(x, t) + V(x)I(x, t) \right] \cdot dt \\ k_1^I = \frac{\partial I}{\partial t}(x, t) \cdot dt = \left[ \frac{1}{2} \frac{\partial^2 R}{\partial x^2}(x, t) - V(x)R(x, t) \right] \cdot dt \end{cases} \quad (19)$$

Uma vez obtidas as atualizações temporais de  $R$  e  $I$  para cada ponto, tem-se então a função de onda  $\Psi(x, t)$  para todas as posições e instantes de tempo de uma determinada simulação, o que torna possível o estudo das demais variáveis de interesse.

É importante destacar que as variáveis  $x$  e  $t$  apresentadas ao longo das relações anteriores são, certamente, variáveis contínuas. Entretanto, do ponto de vista computacional, deve haver um *processo de discretização* associado à implementação numérica dessas equações, de modo que a simulação numérica do sistema possa ser efetuada corretamente.

Além disso, as soluções analíticas da equação (3) (ou (12), em termos das unidades características) são válidas para todo o espaço uma vez que o potencial harmônico tem (a princípio) alcance infinito. De fato, o problema do oscilador harmônico quântico é mais um dos chamados *Problemas de Cauchy*, nos quais são fornecidas uma equação diferencial parcial e a correspondente condição inicial (nesse caso,  $\Psi(x, t = 0)$ ), mas *não são fornecidas condições de contorno* [3].

As condições iniciais de maior interesse neste estudo serão as *auto-funções*  $\psi_n(x)$  (7) do operador hamiltoniano definidas na seção 1, as quais podem ser facilmente incluídas no código de simulação numérica. A ausência de condições de contorno, entretanto, é um fato que não pode ser tratado computacionalmente. O sistema a ser simulado no computador deve possuir algum limite, ou seja, deve estar contido numa região específica dentro da qual o computador executa os cálculos e atualiza a função  $\Psi(x, t)$ . É claro que essa complicação pode ser contornada posteriormente partindo de uma escolha adequada dos parâmetros físicos do sistema, de tal maneira que o oscilador quântico construído tenha características tipicamente semelhantes àquelas associadas aos problemas de Cauchy. Mas esse limite espacial deve existir.

Em vista disso, os sistemas tratados no presente trabalho serão osciladores de alcance espacial  $-L \leq x \leq L$ ,

região essa discretizada em passos  $dx$ , simulados numericamente ao longo de um intervalo temporal  $0 \leq t \leq t_f$  discretizado em passos  $dt$ . A fim de obter um melhor rendimento computacional e garantir uma melhor concordância entre os intervalos discretizados  $x$  e  $t$ , os passos espacial e temporal  $dx$  e  $dt$  estão conectados por meio de um parâmetro  $0 \leq r \leq 1$  tal que:

$$dx = \sqrt{\frac{dt}{2r}} \quad (20)$$

### 3. MANUAL DO CÓDIGO

Uma versão compactada do código utilizado para o desenvolvimento da análise do oscilador harmônico quântico será disponibilizada em conjunto com esse documento. O código completo encontra-se disponível em sua íntegra [neste endereço](#).

A estrutura geral do script, que representa a base das simulações numéricas que serão desenvolvidos ao longo do corpo do presente estudo, se baseia em 7 funções. São elas:

1. *resolve\_Schrodinger*
2. *cria\_vetor\_espacial*
3. *cria\_vetor\_temporal*
4. *auto\_funcao*
5. *valor\_esperado\_E*
6. *valor\_esperado\_x*
7. *cria\_gif*

A função *resolve\_Schrodinger* é a principal entre as citadas anteriormente. É, de fato, a função responsável por executar a simulação do oscilador harmônico e retornar a função de onda  $\Psi(x, t)$ , mas antes de executá-la é necessário executar alguns passos intermediários.

O primeiro deles é definir as constantes  $m$  e  $\hbar$  (em unidades características), a frequência *omega* de oscilação do sistema, o tamanho  $L$  do sistema, o tempo total de simulação  $tf$ , o parâmetro auxiliar  $r$  e o passo temporal  $dt$  da simulação como *variáveis globais* do programa. O número  $n$  correspondente ao auto-estado de energia tomado como condição inicial pode ou não ser definido como uma variável global; é opcional.

Uma vez definidas essas quantidades, deve-se utilizar as rotinas *cria\_vetor\_espacial* e *cria\_vetor\_temporal* para definir a região espacial na qual o sistema a ser simulado se insere e o intervalo de tempo total da simulação.

A rotina *cria\_vetor\_espacial* toma como parâmetros de entrada o tamanho  $L$  do sistema, o passo temporal  $dt$  e o parâmetro numérico auxiliar  $r$ ; e retorna como saída um vetor  $x$  com valores uniformemente espaçados por um passo  $dx$  variando desde  $-L$  até  $L$ , bem como o passo  $dx$  de espaçamento definido de acordo com a equação (20). A rotina *cria\_vetor\_temporal*, por outro lado, toma como parâmetros de entrada o tempo total de simulação  $tf$  e o passo temporal  $dt$ ; e retorna como saída um vetor  $t$ , com valores que variam desde 0 até  $tf$  e que estão uniformemente espaçados de acordo com o passo  $dt$  inserido.

Conforme será discutido na seção 4, as condições iniciais de maior interesse serão as auto-funções (6) dos auto-estados de energia. Para definí-las é necessário chamar a rotina *auto\_funcao*, que toma como parâmetros de entrada o número  $n$  do auto-estado escolhido e um vetor espacial  $x$ ; e retorna como saída um vetor  $\psi_n$  contendo a função  $\psi_n$  calculada em todos os pontos do vetor  $x$ .

Uma vez executados esses procedimentos, a simulação do oscilador harmônico quântico deve ser efetuada com o auxílio da rotina *resolve\_Schrodinger*. Seus parâmetros de entrada são: o vetor espacial  $x$  do sistema, o vetor temporal  $t$  de simulação e o vetor  $\psi_n$  associado à condição inicial de interesse. Seus valores de saída são: uma matriz bidimensional  $\Psi$  (que corresponde à função de onda  $\Psi(x, t)$ ) e um vetor  $N$  contendo os valores de normalização da função de onda para cada instante de tempo.

As funções *valor\_esperado\_E* e *valor\_esperado\_x* têm um papel semelhante dentro da lógica do programa, mas possuem um grau de importância secundário em comparação com a função *resolve\_Schrodinger*. Ambas tomam como parâmetros de entrada a matriz  $\Psi$  obtida da simulação numérica do oscilador harmônico quântico, o vetor de normalização  $N$ , o vetor espacial  $x$ , o passo espacial  $dx$  e o vetor temporal  $t$ ; e retornam como saída os vetores *esp\_E* e *esp\_x* (respectivamente). Esses vetores contêm os valores esperados de energia e de posição para cada instante de tempo do sistema simulado.

Por fim, a função *cria\_gif* toma como parâmetros de entrada a matriz  $\Psi$  correspondente à função de onda simulada, os vetores espacial e temporal  $x$  e  $t$  e uma entrada do tipo string que define o nome do gif a ser criado. Deve-se ter cuidado no momento de execução desta função em particular, pois ela cria diversos gráficos correspondentes a cada frame do gif e os armazena na pasta / diretório em que o código estiver sendo executado. É importante se certificar de apagar todas as figuras antes de criar um novo gif. Além disso, pode ser necessário instalar a biblioteca "imageio" caso o usuário não a tenha previamente instalada no computador.

```
# !Definição das variáveis globais!
m = h_bar = 1 # constantes principais em [u.c.]
omega = 100 # frequência de oscilação

L = 1 # tamanho espacial do sistema
tf = 0.05 # tempo final da simulação
r = 0.075 # parâmetro numérico auxiliar
dt = 0.0001 # passo temporal
n = 0 # auto-estado de energia

# -----

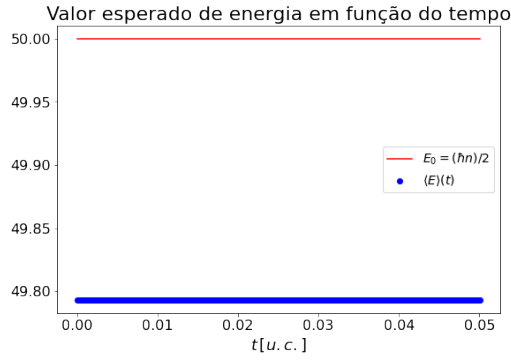
x, dx = cria_vetor_espacial(L, r, dt) # define espaco do sistema
t = cria_vetor_temporal(tf, dt) # define o intervalo temporal da simulação

Psi_t0 = auto_funcao(n, x) # define a condição inicial
Psi, N = resolve_Schrodinger(x, t, Psi_t0) # efetua a simulação numérica do sistema

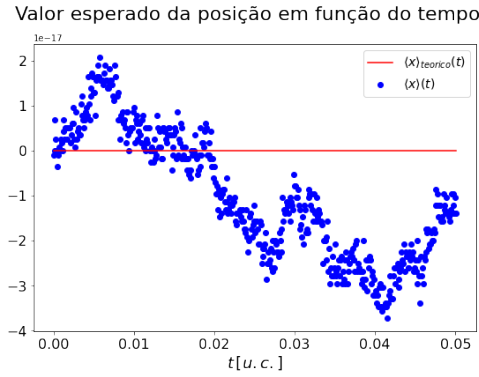
esp_E = valor_esperado_E(Psi, N, x, dx, t) # obtém o valor esperado da energia
esp_x = valor_esperado_x(Psi, N, x, dx, t) # obtém o valor esperado da posição

cria_gif(Psi, x, t, 'exemplo_manual') # cria um gif de evolução temporal da função de onda
```

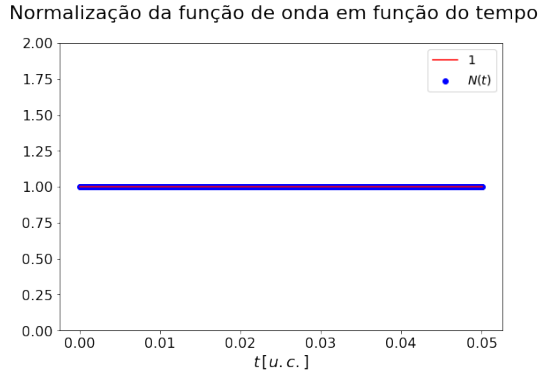
Figura 2: Exemplo básico de implementação das funções e execução da simulação numérica.



(a) Valor esperado de energia do sistema para cada instante de tempo.



(b) Valor esperado da posição do sistema para cada instante de tempo.



(c) Normalização da função de onda do sistema.

**Figura 3:** Resultados obtidos a partir dos códigos da Figura 2.

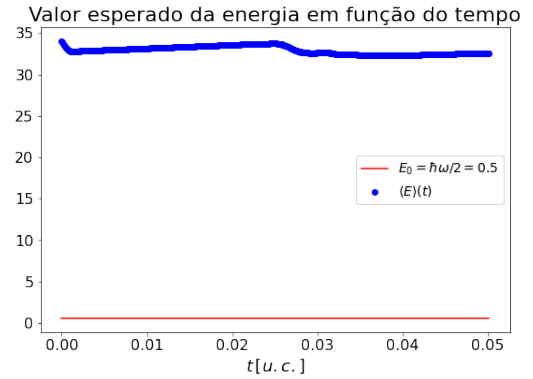
O gif criado na execução do exemplo da Figura 2 encontra-se disponível [neste endereço](#).

De modo geral, pode-se observar que todos os resultados obtidos estão consistentes com os resultados teóricos. O valor esperado da energia do sistema apresentou uma discrepância de aproximadamente  $0.2 u.c.$  com relação ao valor teórico (que, dada a escolha  $\omega = 100 u.c.$ ,

era de  $50 u.c.$ ). O valor esperado da posição apresentou flutuações da ordem  $\sim 10^{-17}$  com relação ao valor teórico  $\langle x \rangle = 0 u.c.$ , conforme pode ser observado na região superior esquerda do eixo vertical no gráfico da Figura 3(b). Assim como os valores esperados da energia e da posição, a condição de normalização também se mostrou perfeitamente consistente com o que se espera de uma função de onda.

### 3.a. Observações sobre as escolhas dos parâmetros de simulação

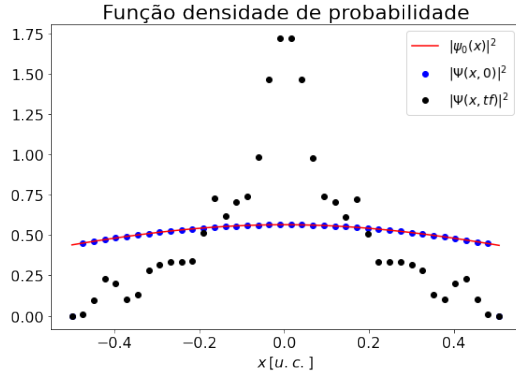
Apesar dos resultados apresentados na Figura 3 terem sido perfeitamente consistentes com os resultados teóricos, é necessário chamar a atenção para o fato de que, dependendo da frequência  $\omega$  associada ao potencial harmônico 1, algumas escolhas de parâmetros podem levar a funções de onda e resultados que não fazem sentido físico.



**Figura 4:** Valor esperado da energia de um sistema problemático em que a escolha do parâmetro  $L$  foi feita de maneira inadequada. Parâmetros de simulação:  $L = 0.5 u.c.$ ,  $t_f = 0.05 u.c.$ ,  $dt = 10^{-4} u.c.$ ,  $r = 0.075$ ,  $\omega = 1 u.c.$ ,  $n = 0$ .

O valor esperado de energia apresentado na Figura 4 se mostra totalmente incoerente com o valor teórico correspondente ao auto-estado  $n = 0$ . Uma vez que  $\langle E \rangle$  depende da função de onda  $\Psi$  associada ao sistema, a expectativa, então, é que haja algum problema com a função de onda numérica sendo simulada computacionalmente.



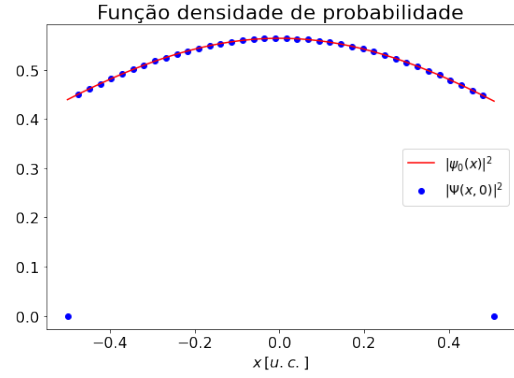


**Figura 5:** Comparação entre a função densidade de probabilidade associada à função de onda simulada numericamente com os parâmetros indicados na Figura 4 e a função densidade de probabilidade teórica para diferentes instantes de tempo.

Conforme argumentado na seção 1 uma vez escolhidas condições iniciais do tipo  $\psi_m(x)$ , os estados do oscilador harmônico quântico são estados estacionários, ou seja, as funções densidade de probabilidade (e, conseqüentemente, o valor esperado de todas as demais variáveis dinâmicas do sistema) devem ser independentes do tempo. No caso particular do estudo sendo feito neste trabalho, no qual a grande maioria dos sistemas serão preparados de tal maneira que  $\Psi(x, t = 0) = \psi_m(x)$ , então a função densidade de probabilidade correspondente deve ser igual a  $|\psi_m(x)|^2$  para todos os instantes de tempo.

Contudo não é isso que se observa no gráfico da Figura 5. Em  $t = 0$  há uma correspondência aceitável, mas isso se deve simplesmente ao fato de que essa é justamente a condição inicial imposta. Em  $t = tf$  as funções de onda são totalmente incompatíveis.

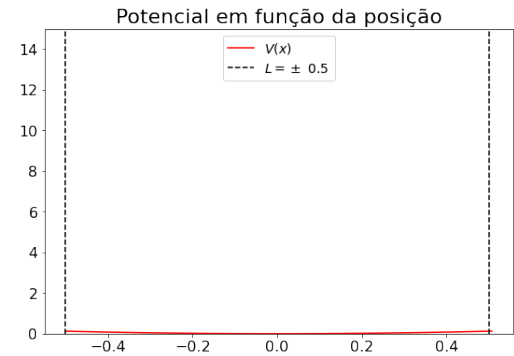
Há ainda uma complicação que não está sendo devidamente evidenciada pelo gráfico da Figura 5. Apesar da aparente boa correspondência entre as funções densidade de probabilidade numérica e teórica em  $t = 0$ , as condições de contorno do programa associadas à escolha do parâmetro  $L$  não estão adequadas para a descrição do sistema em questão. Nos pontos  $x = \pm L$  a função teórica  $|\psi_0(x)|^2$  exige que a função densidade de probabilidade seja finita, enquanto o código de simulação numérica exige que  $|\Psi(x, t)|^2$  seja nula. Tal problema pode ser claramente observado no gráfico da Figura 6.



**Figura 6:** Incompatibilidade entre as funções densidade de probabilidade numérica e teórica nas bordas do sistema, associada a uma imposição inadequada de condição de contorno na função de onda  $\Psi(x, t)$  simulada numericamente.

A justificativa para o resultado absurdo apresentado na Figura 5, portanto, se encontra no fato de que o limite espacial  $L$  escolhido para o sistema em questão não é adequado. Uma vez que  $\omega = 1 \text{ u.c.}$ , o potencial varia pouco nas posições próximas à origem e, assim, exerce pouca influência sobre a partícula do oscilador. O detalhe importante, então, é que a escolha  $L = 0.5 \text{ u.c.}$  para esse valor particular do parâmetro  $\omega$  fez com que o sistema simulado caísse exatamente na região de baixo impacto do potencial  $V$ .

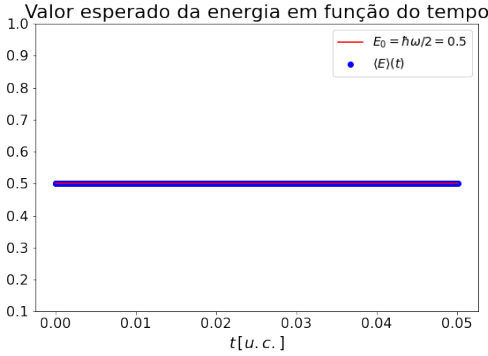
É como se o computador estivesse simulando o problema de uma *partícula livre*, no qual  $V = 0 \forall x$ , e considerando ainda a validade de condições de contorno impróprias.



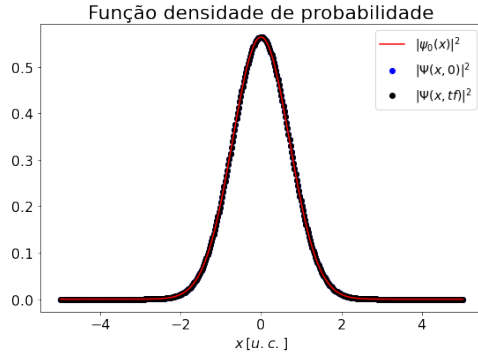
**Figura 7:** Região do sistema sujeita ao potencial harmônico  $V$  dada a escolha  $L = 0.5 \text{ u.c.}$ .

Desse modo, para corrigir as discrepâncias observadas deve-se *aumentar o tamanho* do sistema simulado de tal maneira que a partícula do oscilador esteja numa região de influência significativa do potencial  $V$ . Em outras pala-

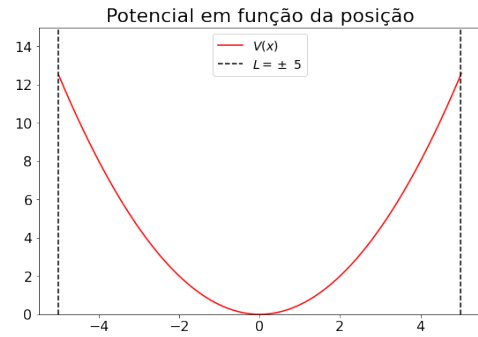
vas, deve-se aumentar o tamanho do sistema simulado até que ele caia dentro da condição de aproximação de alcance infinito discutida na seção 2.



(a) Valor esperado da energia de um sistema em que a escolha do parâmetro  $L$  foi feita de maneira adequada



(b) Comparação entre as funções densidade de probabilidade numérica e teórica calculadas para diferentes instantes de tempo



(c) Região do sistema sujeita ao potencial harmônico  $V$  dada a escolha  $L = 5 \text{ u.c.}$

**Figura 8:** Resultados obtidos para uma nova simulação executada com uma escolha adequada do parâmetro  $L$ . Parâmetros de simulação:  $L = 5 \text{ u.c.}$ ,  $t_f = 0.05 \text{ u.c.}$ ,  $dt = 10^{-4} \text{ u.c.}$ ,  $r = 0.075$ ,  $\omega = 1 \text{ u.c.}$ ,  $n = 0$ .

No que se refere aos parâmetros temporais  $t_f$  e  $dt$  e

ao parâmetro numérico auxiliar  $r$  não há problemas essencialmente físicos associados à simulação. Alterar esses parâmetros irá apenas impactar questões de convergência e de precisão do sistema simulado.

Em particular, uma vez que  $dx$  e  $dt$  estão vinculados via relação (20), aumentar ou diminuir os valores do passo temporal  $dt$  (mantendo  $r$  fixo, por simplicidade) também aumenta ou diminui os valores de  $dx$ . Portanto, aumentar a precisão de  $dt$  (parâmetro que pode ser controlado pelo usuário durante a utilização do código) implica também em um aumento na precisão de  $dx$ .

É importante chamar atenção, contudo, para um cuidado extra que deve ser tomado durante a utilização do código: precisões muito apuradas acabam levando a custos computacionais muito grandes, fato que consequentemente ocasiona em um aumento indesejado no tempo de execução do código.

**Tabela 1:** Apresentação dos tempos totais de simulação e dos passos espaciais  $dx$  obtidos para diferentes escolhas do passo temporal  $dt$ . Resultados apresentados para casos nos quais a dimensão espacial  $L$  do sistema foi corretamente ajustada de modo a simular resultados com consistência física (i.e., convergentes). Parâmetros de simulação:  $L = 1 \text{ u.c.}$ ,  $t_f = 0.05 \text{ u.c.}$ ,  $r = 0.075$ ,  $\omega = 100 \text{ u.c.}$ ,  $n = 0$ .

$dt [\text{u.c.}]$	$dx [\text{u.c.}]$	Tempo de execução $[\text{u.c.}]$
$10^{-1}$	0.817	$4.6 \times 10^{-4}$
$10^{-2}$	0.258	$1.03 \times 10^{-3}$
$10^{-3}$	0.0816	$2.29 \times 10^{-2}$
$10^{-4}$	0.0258	$7.11 \times 10^{-1}$
$10^{-5}$	0.00816	$2.25 \times 10^1$

Todos as 5 simulações feitas para geração dos resultados expressos na tabela 1 fornecem resultados numéricos coerentes com relação aos resultados teóricos esperados. Entretanto, à medida que a precisão do sistema aumenta (i.e.,  $dt$  e  $dx$  ficam cada vez menores), o tempo total de execução do código também aumenta. Em particular, a cada vez que o passo temporal teve sua ordem de grandeza reduzida em 10 vezes ( $dt \rightarrow dt/10$ ), o tempo total  $\Delta t$  para execução da simulação teve sua ordem de grandeza aumentada em 10 vezes ( $\Delta t \rightarrow 10 \cdot \Delta t$ ). Esse resultado sugere uma relação linear de proporção inversa entre as quantidades  $\Delta t$  e  $dt$ , ou seja:  $\Delta t \propto 1/dt$ .

Para a grande maioria das simulações no decorrer serão utilizados os valores  $dt = 0.0001 = 10^{-4} \text{ u.c.}$  e  $r = 0.075$ , os quais representam um meio-termo entre precisão e eficiência no que se refere ao tempo de simulação. Contudo é importante destacar que essa não é uma regra geral e que essa escolha pode variar dependendo do



sistema / caso de interesse.

#### 4. ANÁLISE DOS VALORES ESPERADOS DE ENERGIA

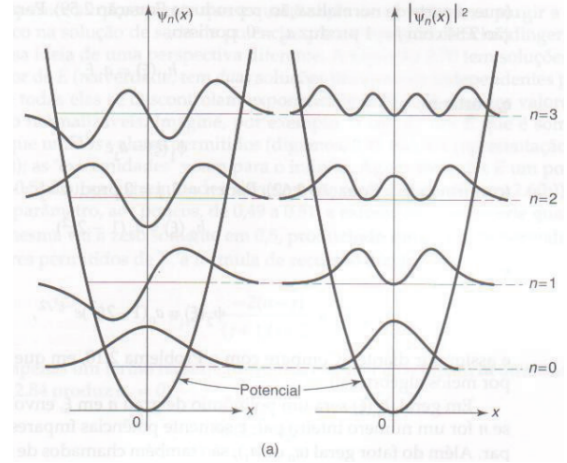
O foco dessa seção é avaliar os valores esperados de energia quando as condições iniciais do sistema simulado numericamente são as auto-funções  $\psi_n(x)$  (6) do operador hamiltoniano. Conforme apresentado na seção 1, uma vez que a condição inicial do sistema quântico seja construída tomando-se alguma das auto-funções de energia do operador hamiltoniano, a principal expectativa é que a função de onda associada à partícula em estudo evolua dentro do estado correspondente à auto-função escolhida. Em outras palavras, espera-se que o valor médio da energia seja algum dos  $E_n$  apresentados na equação (7) para qualquer instante de tempo, já que os estados quânticos do potencial harmônico são estacionários. [1]

**Tabela 2:** Valores esperados de energia em  $t = 0$  u.c. para diferentes auto-funções tomadas como condição inicial. A primeira coluna apresenta o número  $n$  da auto-função escolhida, a segunda o valor verdadeiro (7), a terceira o valor esperado calculado numericamente com base no script de simulação e a quarta os erros percentuais entre o resultado numérico e o resultado teórico. Parâmetros de simulação:  $L = 1$  u.c.,  $tf = 0.05$  u.c.,  $dt = 10^{-4}$  u.c.,  $r = 0.075$  u.c.,  $\omega = 100$  u.c.

	$E_n$	$\langle E \rangle(t=0)$	$\Delta E/E$
$n = 0$	50	49.792	0.414 %
$n = 1$	150	148.966	0.689 %
$n = 2$	250	247.320	1.072 %
$n = 3$	350	344.864	1.467 %
$n = 4$	450	441.606	1.865 %
$n = 5$	550	537.556	2.263 %
$n = 6$	650	632.722	2.658 %
$n = 7$	750	727.113	3.052 %
$n = 8$	850	820.738	3.443 %
$n = 9$	950	913.606	3.831 %

Todos os valores esperados obtidos numericamente são consistentes com os valores teóricos previstos. Um ponto importante que pode ser identificado com base na observação dos dados da tabela 2 é que o erro percentual do valor esperado calculado numericamente aumenta à medida que o número  $n$  do auto-estado de energia correspondente à condição inicial do sistema aumenta. Esse resultado tem total sentido físico uma vez que aumentar o valor de  $n$  é equivalente a colocar a partícula do sistema em estados quânticos mais energéticos, i.e., com frequências de

oscilação cada vez maiores dadas por (7). Não só as auto-funções  $\psi_n(x)$  passam a ter mais flutuações espaciais, mas também a função de onda completa (4) da partícula no estado de energia  $n$  do oscilador harmônico quântico oscila mais intensamente, uma vez que a frequência  $\omega = E/\hbar$  torna-se maior.



**Figura 9:** Parte espacial  $\psi_n(x)$  dos auto-estados de energia do oscilador harmônico quântico para valores crescentes de  $n$ . [2]

De maneira geral, portanto, o aumento nos erros percentuais observados indicam na verdade um problema na precisão da simulação efetuada: o sistema está evoluindo em estágios mais energéticos e a precisão escolhida não está sendo capaz de absorver essa evolução de maneira coerente. Desse modo, caso houvesse interesse em se obter erros percentuais menores (apesar destes apresentados já serem suficientemente aceitáveis para a grande maioria dos fins práticos de análise e de interpretação das características principais do sistema), seria necessário aumentar a precisão da simulação diminuindo o valor do passo temporal  $dt$ .

Conforme argumentado na seção 3.a,  $dt$  e  $dx$  estão vinculados por meio da relação (20). Então, para um  $r$  fixo, aumentar a precisão em  $dt$  significa aumentar também a precisão em  $dx$ . Isso aumenta a quantidade de informação com respeito ao valor de  $\Psi$  a cada ponto do sistema e, conseqüentemente, aumenta a precisão das integrais numéricas associadas ao cálculo de  $\langle E \rangle$  numericamente, fato que acaba causando uma redução nos erros percentuais.

**Tabela 3:** Apresentação dos resultados correspondentes às mesmas simulações da tabela 2, mas agora com uma precisão temporal/espacial 10 vezes melhor (i.e., o novo passo temporal adotado representa 1/10 do anterior). Parâmetros de simulação:  $L = 1 \text{ u.c.}$ ,  $tf = 0.05 \text{ u.c.}$ ,  $dt = 10^{-5} \text{ u.c.}$ ,  $r = 0.075 \text{ u.c.}$ ,  $\omega = 100 \text{ u.c.}$

	$E_n$	$\langle E \rangle(t=0)$	$\Delta E/E$
$n = 0$	50	49.979	0.0416 %
$n = 1$	150	149.896	0.108 %
$n = 2$	250	249.729	0.108 %
$n = 3$	350	349.479	0.149 %
$n = 4$	450	449.147	0.189 %
$n = 5$	550	548.731	0.231 %
$n = 6$	650	648.233	0.271 %
$n = 7$	750	747.653	0.313 %
$n = 8$	850	846.989	0.354 %
$n = 9$	950	946.243	0.395 %

Novamente observa-se um aumento do erro percentual para valores crescentes de  $n$ , e esse comportamento de fato já era esperado tendo em vista as propriedades de  $\Psi(x, t)$  discutidas nos parágrafos anteriores e das características de sua parte espacial  $\psi$  explicitadas na Figura 9, mas agora os erros percentuais são muito menores. Há agora uma coerência muito maior entre os valores numéricos simulados e os valores teóricos esperados.

Uma questão importante que vale a pena ser avaliada também é: a inclusão de uma função complexa na *na condição inicial* da função de onda altera a dinâmica da partícula no problema? Em outras palavras, se ao invés de escolher uma condição inicial do tipo  $\psi_m(x)$ , por exemplo, fosse tomada uma condição inicial com a forma  $\psi_m(x)e^{ik_0x}$ , alguma coisa seria diferente?

Até esse momento no presente trabalho a problemática associada à interpretação da função de onda  $\Psi$  em sistemas quânticos não foi devidamente discutida, e é extremamente fundamental para o entendimento correto dos possíveis efeitos que o termo  $e^{ik_0x}$  podem causar.

Quando se estuda a dinâmica de uma partícula dentro do regime quântico é impossível saber com exata precisão sua posição e seu momento ambos ao mesmo tempo. Esse resultado é chamado de *Princípio da Incerteza de Heisenberg*, e constitui um dos pilares fundamentais da Mecânica Quântica. Uma vez que a posição e o momento de uma partícula em um determinado estado quântico não podem ser acessados com “precisão infinita” ambos ao mesmo tempo, *esses sistemas não podem ser estudados como normalmente são estudados os sistemas clássicos*. Esse fato já foi apresentado superficialmente na seção 1, e é enfatizado novamente aqui.

Além disso, é importante destacar que as funções de onda são, de fato, quantidades complexas. Essa propriedade foi automaticamente atribuída a elas no momento em que a teoria de Schrodinger foi postulada. Dentro dessa teoria, portanto, *não há nenhuma informação física relevante contida em  $\Psi$* , uma vez que não existe nenhum instrumento de medida que seja capaz de determinar quantidades complexas. Não há motivos para se perguntar o que exatamente elas representam ou em qual meio se propagam. São puramente instrumentos matemáticos que têm significado apenas no contexto da teoria de Schrodinger à qual elas fazem parte. [1]

A relação básica entre a função  $\Psi(x, t)$  que soluciona a equação de Schrodinger (2) e as propriedades da partícula no sistema em estudo (que são o que, de fato, existe interesse em se determinar) só foi estabelecida em 1926 com a apresentação da *interpretação probabilística de Max Born*, introduzida no meio científico como um postulado. [1] De acordo com o postulado de Born, a única quantidade à qual se pode ter acesso experimentalmente é a *função densidade de probabilidade*  $|\Psi(x, t)|^2$  da partícula no sistema, de modo que  $|\Psi(x, t)|^2 dx$  representa a probabilidade de encontrar a partícula entre as posições  $x$  e  $x + dx$  para uma medida desse *observável* executada no instante  $t$ .

É fato que a função densidade de probabilidade em  $t = 0$  permanecerá inalterada com a modificação acrescentada à condição inicial uma vez que  $|\psi_m(x)e^{ik_0x}|^2 = |\psi_m(x)|^2$ . Contudo, o valor esperado da energia nesse instante ainda assim irá diferir daqueles apresentados nas tabelas 2 e 3 uma vez que a aplicação do operador hamiltoniano em  $\Psi(x, t = 0)$  não é mais, simplesmente, o valor  $E_m$  correspondente. Isso acontece porque o estado quântico avaliado *não é mais um auto-estado de energia* (como foi o caso até o presente momento).

$$\begin{aligned}
 \langle E \rangle(t=0) &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, 0) \mathcal{H} \Psi(x, 0) dx \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, 0) \mathcal{H} (\psi_m(x) e^{ik_0x}) dx \\
 &\neq E_m \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, 0) \Psi(x, 0) dx = E_m
 \end{aligned} \tag{21}$$

**Tabela 4:** Comparação dos valores esperados de energia em  $t = 0$  para diferentes auto-funções tomadas como condição inicial. Os valores da segunda coluna (denotados por  $\langle E \rangle$ ) foram calculados sem a presença da exponencial complexa na condição inicial, enquanto os valores da terceira coluna (denotados por  $\langle E' \rangle$ ) com a presença de uma exponencial complexa de parâmetro  $k_0 = 5 \text{ u.c.}$  A quarta coluna apresenta a discrepância absoluta entre ambos. Parâmetros de simulação:  $L = 1 \text{ u.c.}$ ,  $tf = 0.05 \text{ u.c.}$ ,  $dt = 10^{-5}$ ,  $r = 0.075$ ,  $\omega = 100 \text{ u.c.}$

	$\langle E \rangle(t = 0)$	$\langle E' \rangle(t = 0)$	$\Delta \langle E \rangle$
$n = 0$	49.979	62.457	12.477
$n = 1$	149.896	162.332	12.394
$n = 2$	249.479	262.124	12.394
$n = 3$	349.479	361.833	12.353
$n = 4$	449.147	461.459	12.312
$n = 5$	548.732	561.002	12.271
$n = 6$	648.234	660.463	12.229
$n = 7$	747.653	759.840	12.188
$n = 8$	846.988	859.135	12.147
$n = 9$	946.243	958.348	12.106

A principal informação que pode ser extraída com base na observação dos resultados da tabela 4 é que a presença da exponencial complexa na condição inicial transladou os valores esperados da energia por cerca de 12 unidades acima dos valores considerados aceitáveis para a situação de ausência da exponencial complexa. A expectativa, portanto, é que a inclusão do termo  $e^{ik_0x}$  na condição inicial aumente os valores esperados de energia por uma certa quantia que depende da escolha do parâmetro  $k_0$ .

Entretanto essa conclusão não pode ser afirmada com certeza já que, para isso, seria necessário obter a expressão analítica completa correspondente à evolução temporal da função de onda  $\Psi(x, t)$  e verificar quais seriam os resultados previstos teoricamente. O desenvolvimento desse procedimento para essa situação em particular, contudo, não é nada trivial. Diferentemente do caso simplificado em que  $\Psi(x, t = 0) = \psi_m(x)$ , para o qual o coeficiente genérico  $c_n$  da expansão (9) é simplesmente  $\delta_{mn}$  (delta de Kronecker), para a nova condição inicial  $\Psi(x, t = 0) = \psi_m(x)e^{ik_0x}$  a obtenção dos coeficientes  $c_n$  exige uma aplicação mais sofisticada das relações de ortogonalidade das auto-funções  $\psi_n$ , que foge às intenções deste estudo.

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \Psi_n(x, t) \neq \psi_m(x) e^{ik_0x} e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t} \quad (22)$$

Apesar da dificuldade associada à determinação analítica de  $\Psi$  nessa situação, gifs de evolução temporal da

função de onda correspondente às simulações da tabela 4 foram construídos e disponibilizados [neste endereço](#). Para que os arquivos criados não fossem excessivamente pesados, o passo temporal das simulações supracitadas teve sua precisão reduzida de  $10^{-5} \text{ u.c.}$  para  $10^{-4} \text{ u.c.}$

## 5. O TEOREMA DE EHRENFEST

Atribuído ao físico e matemático austríaco P. Ehrenfest, que originalmente deduziu os resultados em 1927, o *Teorema de Ehrenfest* diz respeito à evolução temporal de operadores na Mecânica Quântica. De maneira geral, dado um certo operador  $B$ , associado a algum observável físico de interesse, o Teorema de Ehrenfest diz que a taxa de variação temporal do valor esperado desse operador é dada por: [6]

$$\frac{d\langle B \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [B, \mathcal{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial B}{\partial t} \right\rangle \quad (23)$$

na qual  $\mathcal{H}$  representa o operador hamiltoniano do sistema em estudo.

Consideremos uma aplicação desse teorema, dentro do contexto do oscilador harmônico quântico, para o operador posição  $x$ .

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\langle x \rangle}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} \langle [x, \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2] \rangle + \left\langle \frac{\partial x}{\partial t} \right\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left\langle \frac{1}{2m} [x, p^2] + \frac{1}{2}m\omega^2 [x, x^2] \right\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left\langle \frac{1}{2m} ([x, p]p + p[x, p]) \right\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left\langle \frac{1}{2m} \cdot 2i\hbar p \right\rangle \\ &= \frac{\langle p \rangle}{m} \end{aligned} \quad (25)$$

onde foram utilizados o fato de que o operador  $x$  não depende explicitamente do tempo e o resultado  $[x, p] = i\hbar$ .

É importante destacar que o resultado final obtido pela manipulação (25) é muito semelhante à relação clássica  $p/m = (dx/dt)$ . Este é só mais um dentre os diversos exemplos de aplicação do Teorema de Ehrenfest, contudo ilustra uma importante característica intrínseca a ele e que, de fato, pode ser vista como uma outra maneira totalmente equivalente de enunciá-lo: [2]

*Os valores esperados dos operadores quânticos seguem as mesmas leis da Mecânica Clássica.*

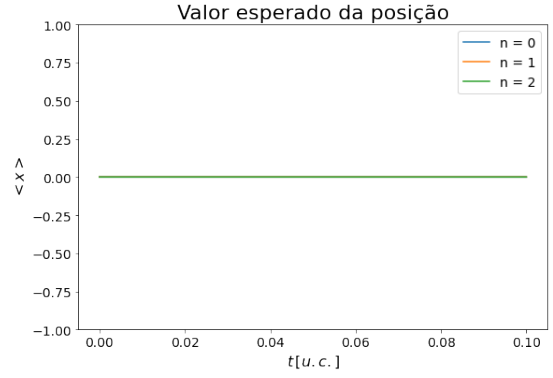
Esse enunciado expressa, de certa maneira, uma importante relação / vínculo entre sistemas clássicos e quânticos: no limite em que a dinâmica temporal dos operadores quânticos é avaliada em termos de valores médios, calculados com base na distribuição de probabilidade correspondente à função de onda do sistema, obtém-se um comportamento completamente análogo ao comportamento clássico dos observáveis associados.

Portanto, a expectativa é que o valor esperado da posição da partícula dentro de um dado oscilador harmônico quântico se comporte exatamente como a posição clássica se comportaria em um oscilador harmônico simples. Levando adiante o resultado (25) e aplicando uma derivada temporal em ambos os lados da igualdade, obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} &= \frac{1}{m} \frac{d \langle p \rangle}{dt} \\ &= \frac{1}{m} \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle \\ &= -\omega^2 \langle x \rangle \end{aligned} \quad (26)$$

Ou seja,  $\langle x \rangle$  deve executar oscilações harmônicas (senoidais) em torno do ponto de origem  $x = 0$ , uma vez que classicamente há uma força restauradora que mantém a partícula em uma situação de equilíbrio estável nessa região.

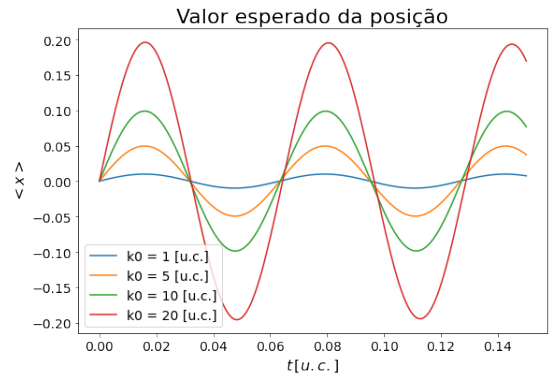
Vale ressaltar, porém, que a dependência temporal de  $\langle x \rangle$  depende da escolha da condição inicial. Caso  $\Psi(x, t = 0)$  seja alguma das auto-funções  $\psi_n$ , valem todas as propriedades estacionárias apresentadas ao longo da seção 1 e, portanto,  $\langle x \rangle$  será uma quantidade independente do tempo. Em particular,  $\langle x \rangle$  será nulo para qualquer auto-função escolhida (i.e., o valor médio da posição será a origem  $x = 0$  para todos os instantes de tempo).



**Figura 10:** Comportamento do valor esperado da posição para diferentes escolhas de auto-função como condição inicial. Parâmetros de simulação:  $L = 0.5 \text{ u.c.}$ ,  $t_f = 0.1$ ,  $dt = 10^{-5} \text{ u.c.}$ ,  $r = 0.075$ ,  $\omega = 100 \text{ u.c.}$

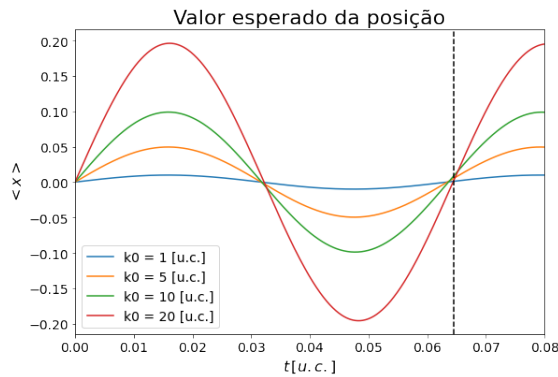
Entretanto, caso  $\Psi(x, t = 0)$  seja uma função qualquer essas propriedades estacionárias deixam de valer e, consequentemente, o comportamento oscilatório (26) passa a ser verificado. Para avaliar o comportamento oscilatório típico do oscilador harmônico clássico é necessário, portanto, inserir uma condição inicial não trivial. Dentro do contexto deste estudo, será utilizada uma condição inicial do tipo  $\Psi(x, t = 0) = \psi_0(x)e^{ik_0x}$ , já tratada anteriormente.

Uma observação atenta do gráfico expresso na Figura 11 indica exatamente o comportamento oscilatório senoidal esperado. Em especial, é possível observar também que, quanto maior o valor da escolha do parâmetro  $k_0$ , maior é a amplitude de oscilação do sistema. Esse fato sugere que o parâmetro em questão está, de alguma forma, associado à energia total da partícula no sistema.



**Figura 11:** Comportamento do valor esperado da posição para diferentes escolhas do parâmetro  $k_0$  no termo exponencial para a auto-função  $\psi_0(x)$ . Parâmetros de simulação:  $L = 1 \text{ u.c.}$ ,  $t_f = 0.15 \text{ u.c.}$ ,  $dt = 10^{-4} \text{ u.c.}$ ,  $r = 0.075$ ,  $\omega = 100 \text{ u.c.}$ ,  $n = 0$ .

Além disso, dada a escolha  $\omega = 100 \text{ u.c.}$  para a frequência correspondente ao potencial harmônico (1), tem-se que o período de oscilação seria  $T = 2\pi/\omega \approx 0.06 \text{ u.c.}$  De fato, as oscilações do valor esperado da posição na Figura 11 têm um período aproximadamente igual a  $0.064 \text{ u.c.}$ . Esse resultado é consistente com o valor teórico correspondente à escolha de frequência feita e corrobora o vínculo entre o comportamento de  $\langle x \rangle$  no oscilador harmônico quântico e de  $x$  no oscilador harmônico clássico.



**Figura 12:** Apresentação do mesmo gráfico da Figura 11, mas com um intervalo reduzido para melhor avaliar o período de oscilação de  $\langle x \rangle$ . A linha preta tracejada foi incluída no instante  $t = 0.0645 \text{ u.c.}$ , que denota o instante no qual o valor esperado da posição executa uma oscilação completa.

As animações correspondentes às funções de onda obtidas a partir de cada um dos valores  $k_0$  apresentados na Figura 12, incluídos na condição inicial da forma  $\psi_0(x)e^{ik_0x}$ , encontram-se disponíveis [neste endereço](#).

## 6. CONCLUSÃO

O oscilador harmônico, em particular o oscilador harmônico quântico, é um sistema muito rico que possui

aplicações em diversas áreas não só da física, mas também da química e da engenharia. Muitas de suas propriedades são exploradas ao longo da construção de aparelhos eletrônicos, no estudo de propriedades moleculares com base em suas características vibracionais, etc.

Todos os resultados apresentados e explorados ao longo deste trabalho apresentam uma excelente concordância entre o modelo teórico e o código de simulação numérica, fato que abre a possibilidade de utilização dessa ferramenta computacional na descrição de sistemas quânticos sujeitos a diversos outros tipos de potencial com base na Teoria de Schrodinger.

## REFERÊNCIAS

- [1] Robert Martin Eisberg e Robert Resnick. *Quantum physics of atoms, molecules, solids, nuclei and particles; 2nd ed.* New York, NY: Wiley, 1985. URL: <https://cds.cern.ch/record/105889>.
- [2] D.J. Griffiths e P.D.J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. Pearson international edition. Pearson Prentice Hall, 2005. ISBN: 9780131118928. URL: <https://books.google.com.br/books?id=z4fwAAAAAAAJ>.
- [3] Gabriel Teixeira Landi. *Notas de aula - Física Matemática I*. 2020.
- [4] Edivaldo Moura Santos. *Notas de aula - Física Quântica*. 2022. URL: <https://edisciplinas.usp.br/course/view.php?id=97853&section=4#tabs-tree-start>.
- [5] Luis Gregório Dias da Silva. *Notas de aula - Métodos Computacionais em Física*. 2022. URL: <https://edisciplinas.usp.br/course/view.php?id=95887&section=0#tabs-tree-start>.
- [6] Alexandre A. P. Suaide. *Notas de aula - Mecânica Quântica 1*. 2021. URL: <https://edisciplinas.usp.br/course/view.php?id=91326>.