Parte 01 - Resolução do experimento do poço quadrado in finito Dadas as seguintes condições ao poço.

A Energia Potencial é:

V(x) = 0; se 0 < x < L

V(x) = oo; se x < 0 e x > L

Para V(x) = 0, seleciotttna-se a Equação de Schroedinger, unidimension ale independente do tempo:

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

Para a Equação acima, são soluções:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

É objetivo desta Parte 01, determinar os coeficientes c, por meio da solução seguinte integral:

$$c_n = \int_0^L \psi_n(x)\Psi(x, t = 0)dx$$

O código da primera partae

In [32]:
```
#Bibliotecas

import matplotlib.animation as animation
from IPython.display import HTML
import matplotlib.pyplot as plt
import scipy.integrate as spi
import numpy as np
%matplotlib fdaf
%matplotlib inline
```

$$\Psi(x, 0) = x \in \left[0, \frac{L}{2}\right]$$

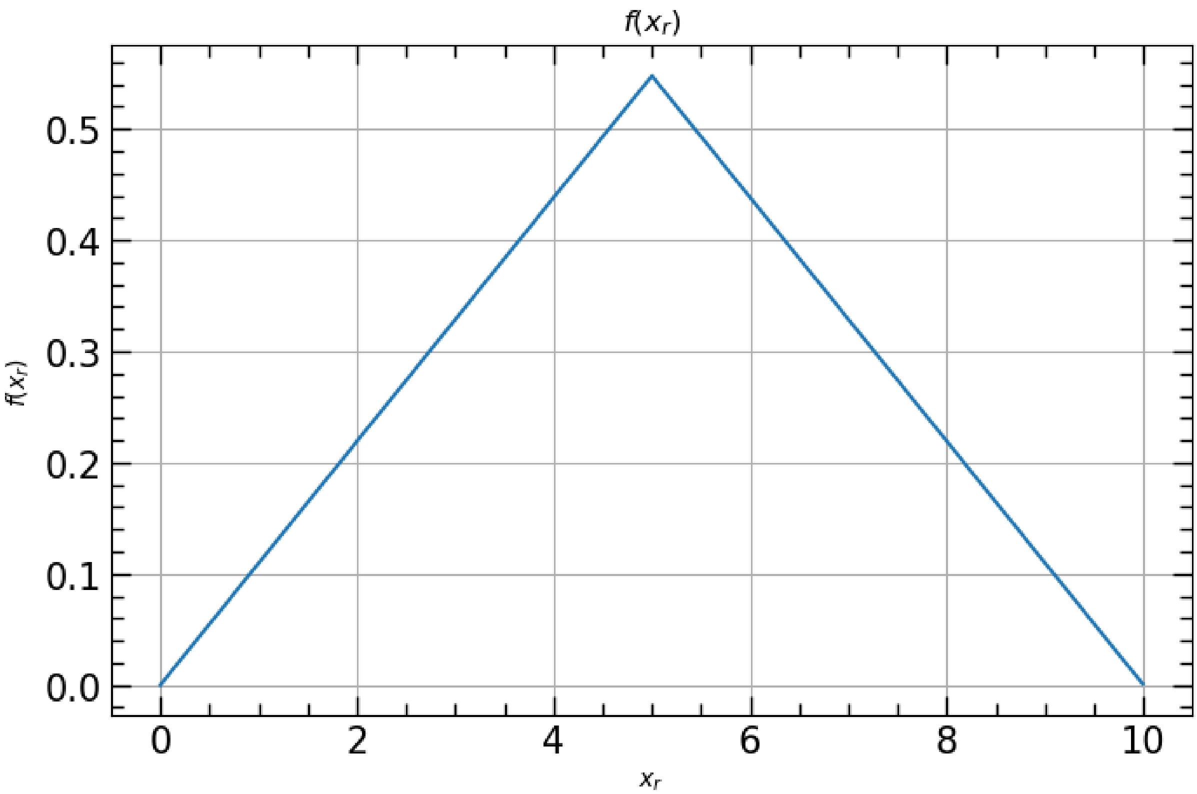
$$\Psi(x,0) = x \in \left[\frac{L}{2}, L\right]$$

In [35]:
```
## Para a enrgia -En- da particula:

def f(x,L):
    ener_p = np.sqrt(12./(L*L*L))
    return (np.piecewise(x,[x<L/2.,x>=L/2.],
                         [lambda x: ener_p*x,
                         lambda x: ener_p*(L-x)]))
```

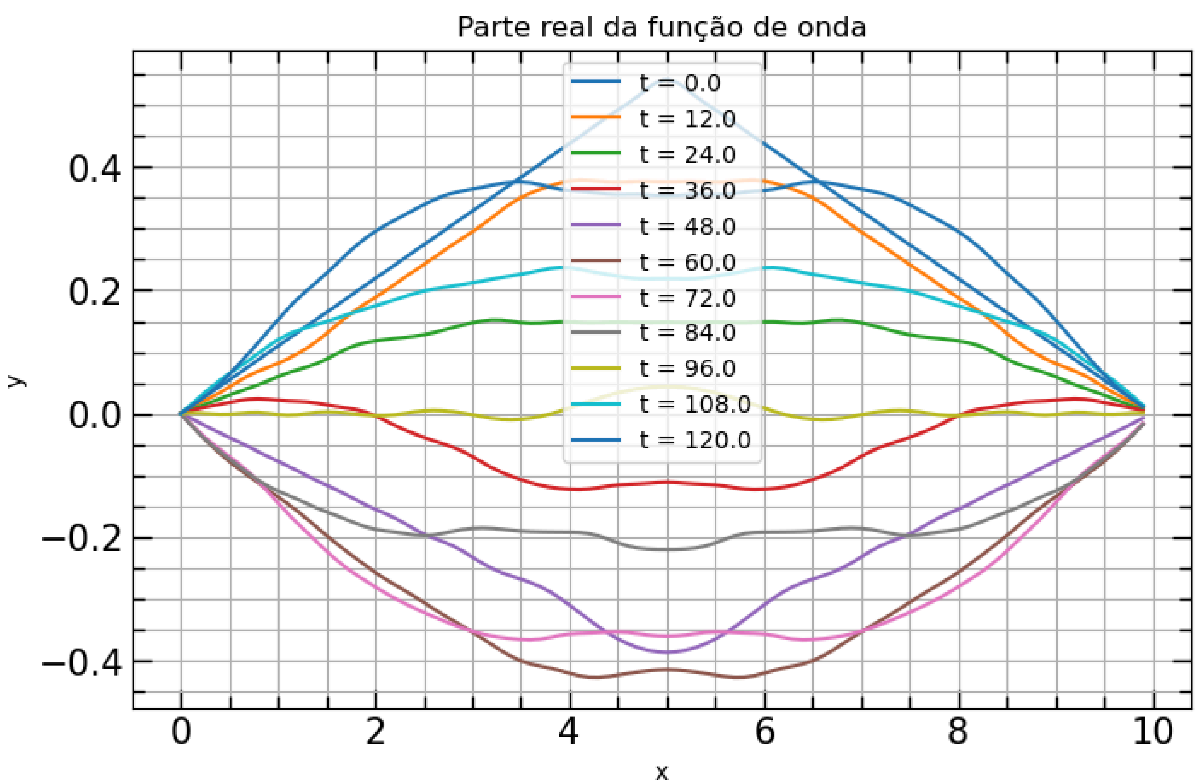
In [37]:
```
## Para a função de onda da particula:

def psi_n(x,n,L):
    return (np.sqrt(2./L)*np.sin(n*x*np.pi/L))
```

O primeiro gráfico:

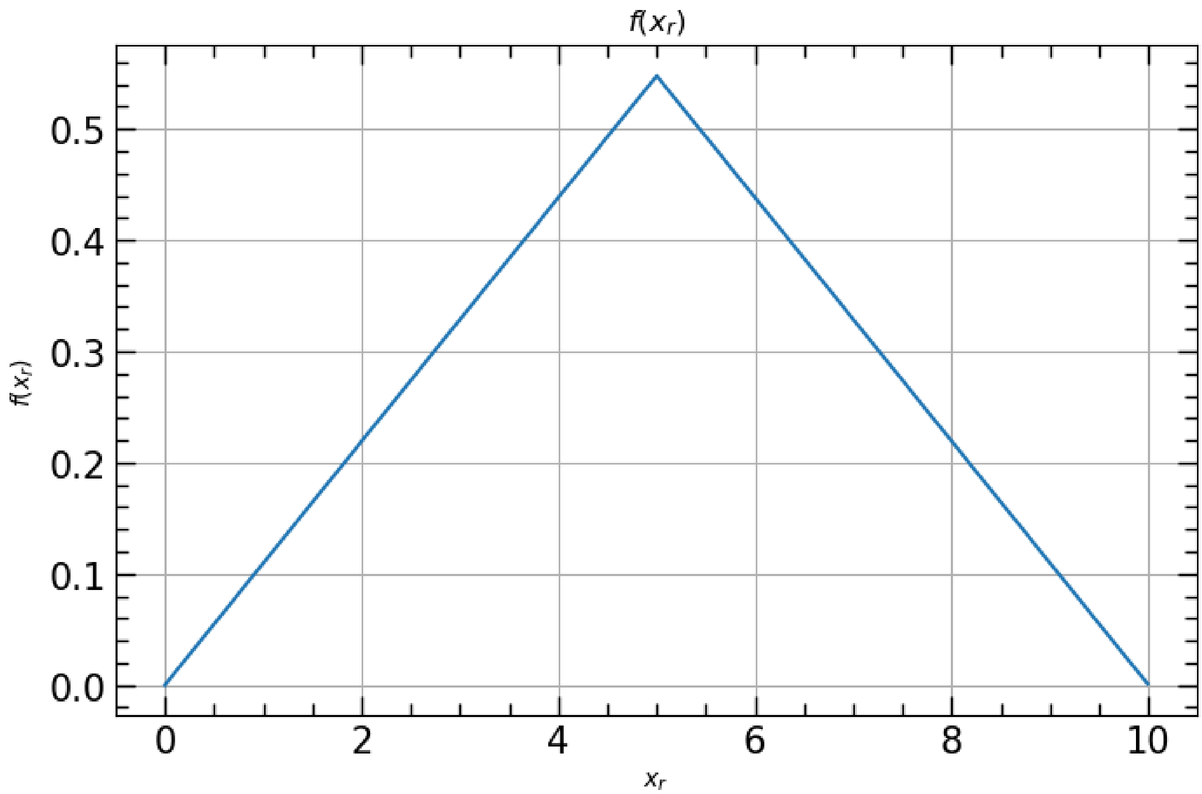
In [40]:
```
def opt_plot():
    plt.minorticks_on()
    plt.tick_params(axis='both',which='minor', direction = "in",
                    top = True,right = True, length=5,width=1,
                    labelsize=15)
    plt.tick_params(axis='both',which='major', direction = "in",
                    top = True,right = True, length=8,width=1,
                    labelsize=15)

x_r = np.arange(0,10,0.01)

plt.figure(figsize=(8,5))
plt.plot(x_r,f(x_r,10))
plt.title(r'$f(x_{r})$')
plt.xlabel(r'$x_{r}$')
plt.ylabel(r'$f(x_{r})$')
plt.grid()
opt_plot()

plt.savefig('f(x_r).png')
```



$f(x_r)$
0.0
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5
$f(x_r)$
0
2
4
6
8
10
x_r



Parte real da função de onda
t = 0.0
t = 12.0
t = 24.0
t = 36.0
t = 48.0
t = 60.0
t = 72.0
t = 84.0
t = 96.0
t = 108.0
t = 120.0
−0.4
−0.2
0.0
0.2
0.4
y
0
2
4
6
8
10
x



Calcula-se, agora, a constante c para um n específico:

In [43]:
```
def int_fun(x,n,L):
    return (f(x,L)*psi_n(x,n,L))

def c(n,L):
    if n==0 or n%2==0:
        return (0)

    return (spi.quad(int_fun,0,L,args=(n,L),limit=100)[0])
```

A integração é feita até o ítem c_{39}

In [46]:
```
Nmax=40
L_1 = 10.               # Largura do poço.
L_step = 10./100.
nl = np.array(range(Nmax))
cx = np.array([c(n,10.) for n in nl])

print(cx[0],cx[1],cx[2],cx[3],cx[4])
print(np.sum(cx*cx),cx[Nmax-1])
```

```
0.0 0.9927408002342286 0.0 -0.11030453335935887 0.0
0.9999974367055641 -0.0006526895465042513
```

Tendo encontrado um padrão para resolução da constante c_n, é programada a primeira versão, ainda rústica, da função de onda dependente do tempo.

Para tal, admitem-se $m = 1$ e $\hbar = 1$, onde formula-se E=c

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x) -> -\frac{d}{dx}\psi(x) = \frac{2mc}{\hbar}dt$$

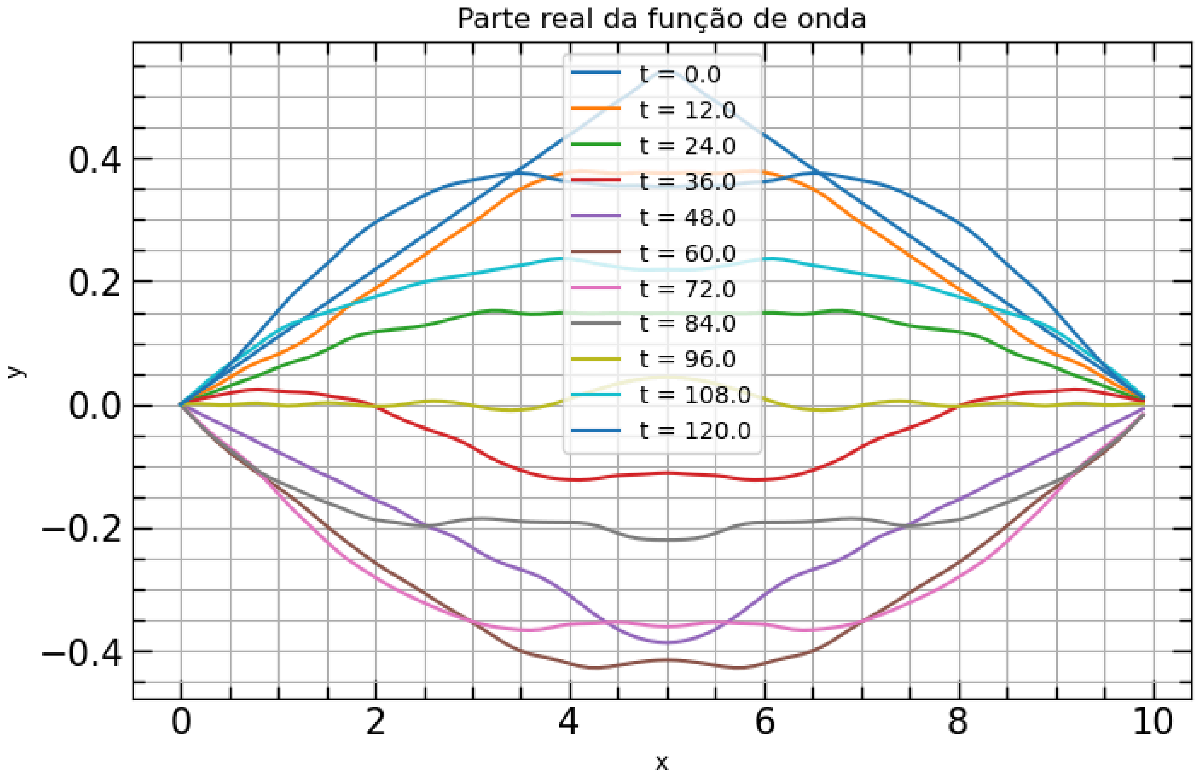
$$resultando:$$

$$\psi(t) = e^{\frac{-i\,\mathrm{E}\,t}{\hbar}}$$

In [49]:
```
def E(n,L):
    return(n*n*np.pi*np.pi/(2.*L*L))

def psi_f(x,t,L):
    ener_p =np.sqrt(2/L)
    out = 0
    n_r = np.array(range(Nmax))
    out = cx*ener_p*np.sin(x*n_r*np.pi/L)*np.exp(-1.j*E(n_r,L)*t)
    s = np.sum(out)

    return(s)
```

Gráfico da parte real da função de onda. Ainda não normalizada.

In [52]:
```
x_r = np.arange(0,10.,.1)
plts = []

plt.figure(figsize=(8,5))

for t in np.arange(0.,128.,12.):
    y_p = [np.real(psi_f(x,t,10.)) for x in x_r]
    pp = plt.plot(x_r,y_p,label="t = {}".format(t))
    plt.title("Parte real da função de onda")
    plt.xlabel("x")
    plt.ylabel("y")
    plt.legend(loc = 'best')
    plt.grid(True,which='both')
    plts.append(pp)
    opt_plot()

    plt.savefig('Parte real da função de onda.png')
```


Parte real da função de onda
y
x
0.4
0.2
0.0
−0.2
−0.4
0
2
4
6
8
10
t = 0.0
t = 12.0
t = 24.0
t = 36.0
t = 48.0
t = 60.0
t = 72.0
t = 84.0
t = 96.0
t = 108.0
t = 120.0

```
In [ ]:
```