

## SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER PARA POÇOS UNIDIMENSIONAIS

A equação de Schrödinger descreve a partícula em uma função de onda  $\psi(x, t)$ ,  
Que pode ser obtida a partir da equação:

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

e,

- \*  $V(x)$  é uma função de energia potencial de interação com o meio.
- \*  $m$  é a massa.
- \*  $\hbar$  é a constante de Planck

A função de onda  $\psi(x, t)$ , não é um observável físico, apesar de ser em função de valores reais, pelo fato dela incorporar um número imaginário e por isso assumir valores complexos.

Para o método numérico usamos a equação de Schrödinger fatorada para que se torne independente do tempo:

$$\frac{\partial^2 \psi(u)}{\partial u^2} = [P(u) - \epsilon] \psi(u), \text{ com } x = u \cdot a \text{ sendo } a \text{ a unidade de comprimento.}$$

O método usado para calcular  $\psi$  foi,

A primeira derivada  $\psi(u)$  no ponto  $v_i = \frac{u_i + u_{i-1}}{2}$ ,

$$\frac{d\psi}{du} = \frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{H}, \text{ com } H \text{ sendo a o intervalo de largura.}$$

A segunda aplicada no ponto  $w_i = \frac{u_i + u_{i+1}}{2}$ ,

$$\frac{d\psi}{du} = \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{H}.$$

com isso nós podemos atualizar  $\psi_{i+1}$ , que é,

$$\psi_{i+1} = (2 + H^2 [P(u_i) - \epsilon]) \psi_i - \psi_{i-1}$$

Para as condições de contorno;

Consideramos a função  $P(u)$  um poço de potencial onde a partícula está confinada numa região limitada a nossa escolha.

Na teoria clássica, se temos uma energia  $E$ , a partícula estaria confinada entre os pontos A e B.

Mas como estamos tratando de probabilidades, há a chance de encontrar a partícula além do ponto A e além do ponto B, essa chance porém, diminui à medida que a partícula se afasta do ponto central  $u$ , então respeita-se a relação:

$$\begin{aligned} - \psi(u \rightarrow +\infty) &\rightarrow 0 \\ - \psi(u \rightarrow -\infty) &\rightarrow 0 \end{aligned}$$

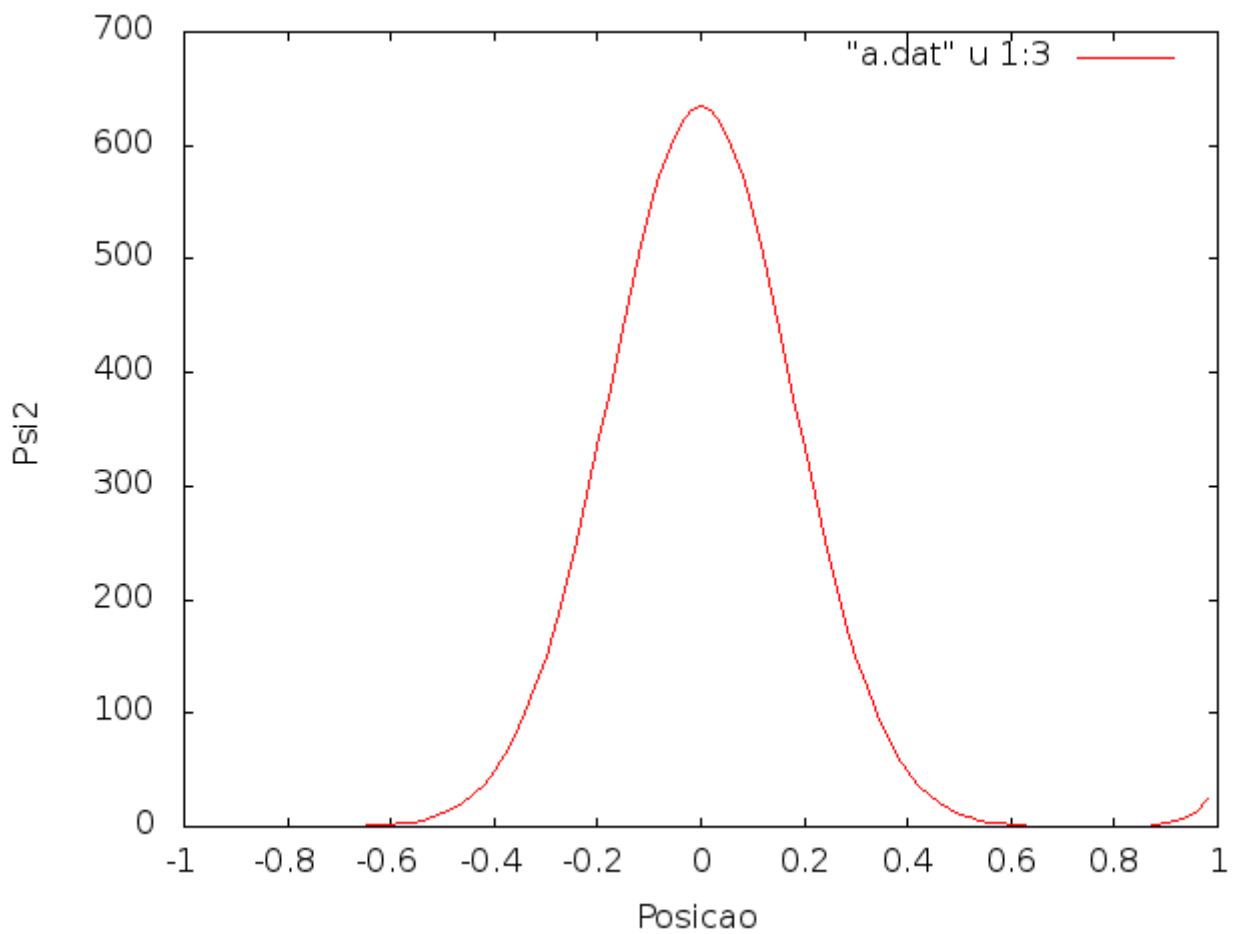
Nessas regiões a energia potencial é maior que a energia total  $E$ , conclui-se que apenas energias bem definidas para que as duas condições de contorno sejam respeitadas, as energias são quantizadas.

Se o potencial for maior que a energia total, a segunda derivada vai ter o mesmo sinal da primeira. Além da parede o potencial é infinito.

Usamos o poço simétrico  $u = -u$  para que os potenciais sejam idênticos para os dois lados, assim a tangente horizontal no ponto  $u$  seja igual a zero e então podemos atribuir de antemão os valores de  $\psi_0$  e  $\psi_1$ .

A densidade de probabilidade da partícula no poço;

A interpretação probabilística da função de onda é a probabilidade de encontrar a onda -partícula entre os pontos  $x$  e  $x+dx$ , a chance de encontrar a partícula em qualquer ponto do eixo  $x$  é igual a 1, ou seja 100%.  
Como indica o gráfico



Para testarmos em um poço quadrado infinito;

Usamos a solução analítica das energias permitidas

$$\epsilon_1 = \pi^2, \epsilon_2 = 4\pi^2, \epsilon_3 = 9\pi^2 \text{ e } \epsilon_4 = 16\pi^2$$

Sendo um poço simétrico escolhemos os valores iniciais;

- $\psi_0 = 0$  e  $\psi_1 = 0.1$  , para as energias  $\epsilon_2$  e  $\epsilon_4$  ;
- $\psi_1 = \psi_0 = 1$  , para as energias  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_3$  ;

E para um poço finito as energias permitidas são;

$$\epsilon_1 = 6.83, \epsilon_2 = 26.96, \epsilon_3 = 58.9 \text{ e } \epsilon_4 = 96.3$$

Sendo um poço simétrico escolhemos os valores iniciais;

- $\psi_0 = 0$  e  $\psi_1 = 0.1$  , para as energias  $\epsilon_2$  e  $\epsilon_4$  ;
- $\psi_1 = \psi_0 = 1$  , para as energias  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_3$  ;

Para o potencial  $P(u) = 256u^2$  , que nós usamos para essa simulação,

as energias permitidas são;

$$\epsilon_1 = 16, \epsilon_2 = 48, \epsilon_3 = 80 \text{ e } \epsilon_4 = 112$$

Sendo um poço simétrico escolhemos os valores iniciais;

- $\psi_0 = 0$  e  $\psi_1 = 0.1$  , para as energias  $\epsilon_2$  e  $\epsilon_4$  ;
- $\psi_1 = \psi_0 = 1$  , para as energias  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_3$  ;

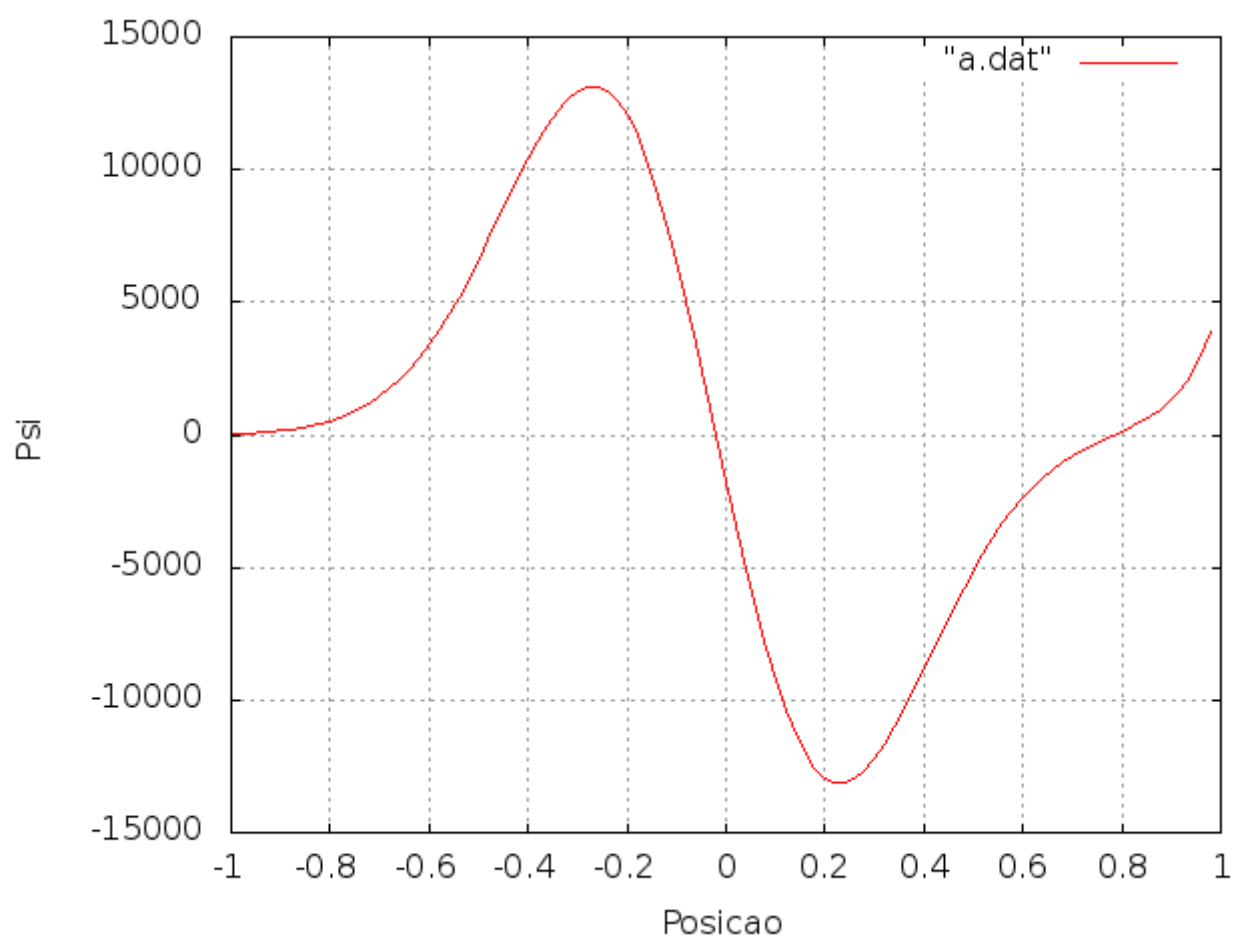
Para testarmos as afirmações plotamos os gráficos abaixo:

Para,

$$\psi_0=0 \text{ e } \psi_1=0.1$$

e

$$\epsilon_2=48$$

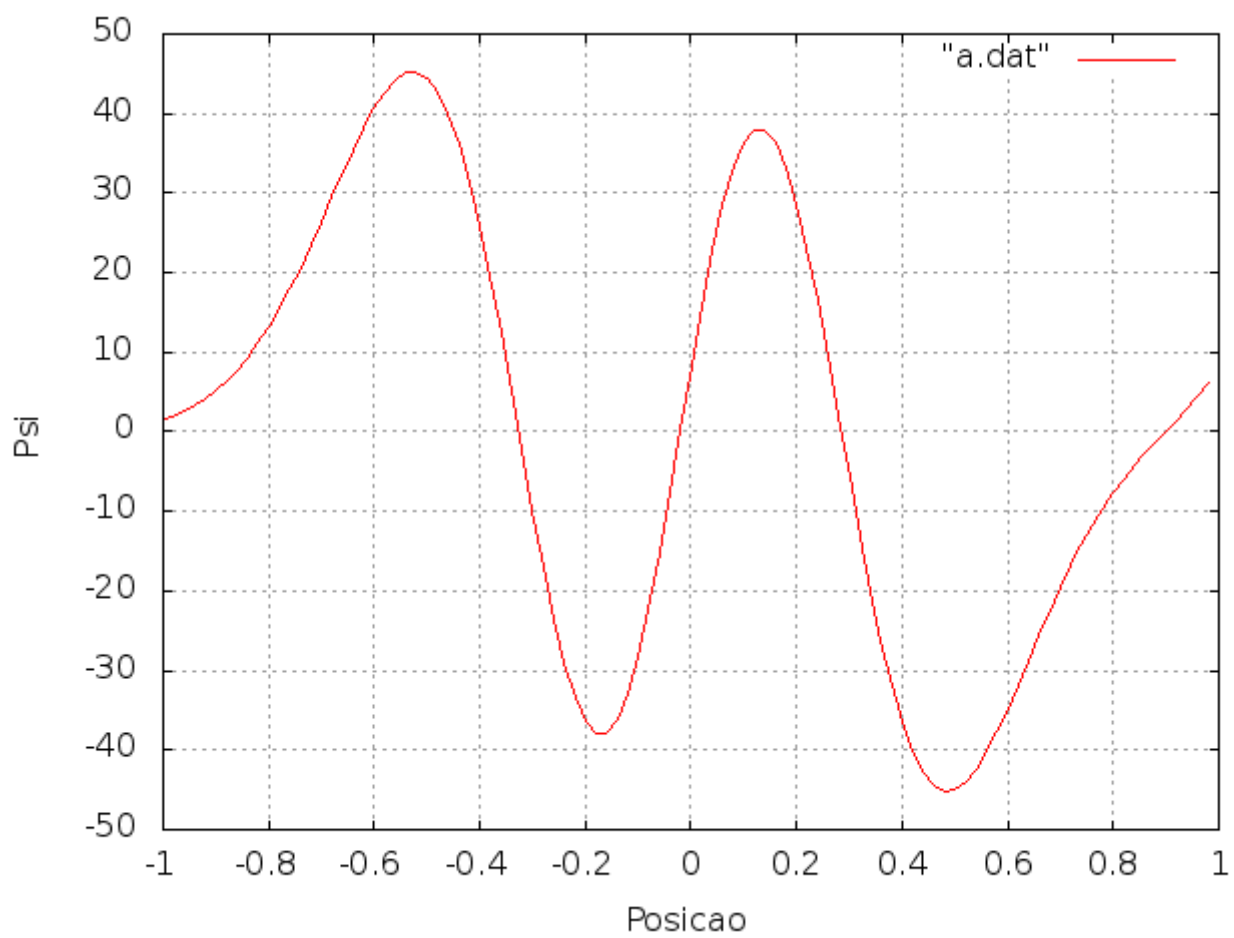


Para,

$$\psi_0=0 \text{ e } \psi_1=0.1$$

e

$$\epsilon_4=112$$

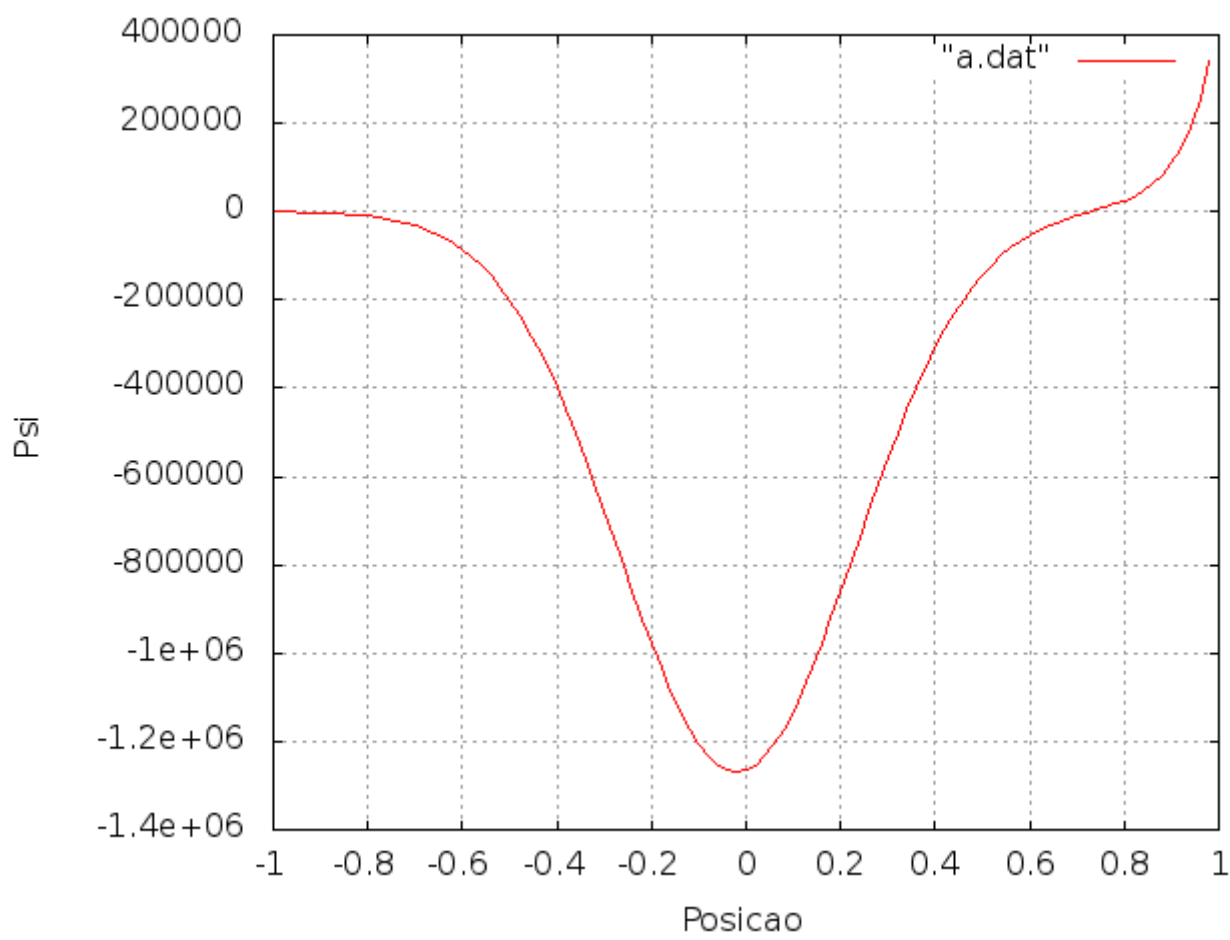


Para,

$$\psi_0=\psi_1=1$$

e

$$\epsilon_1=16$$

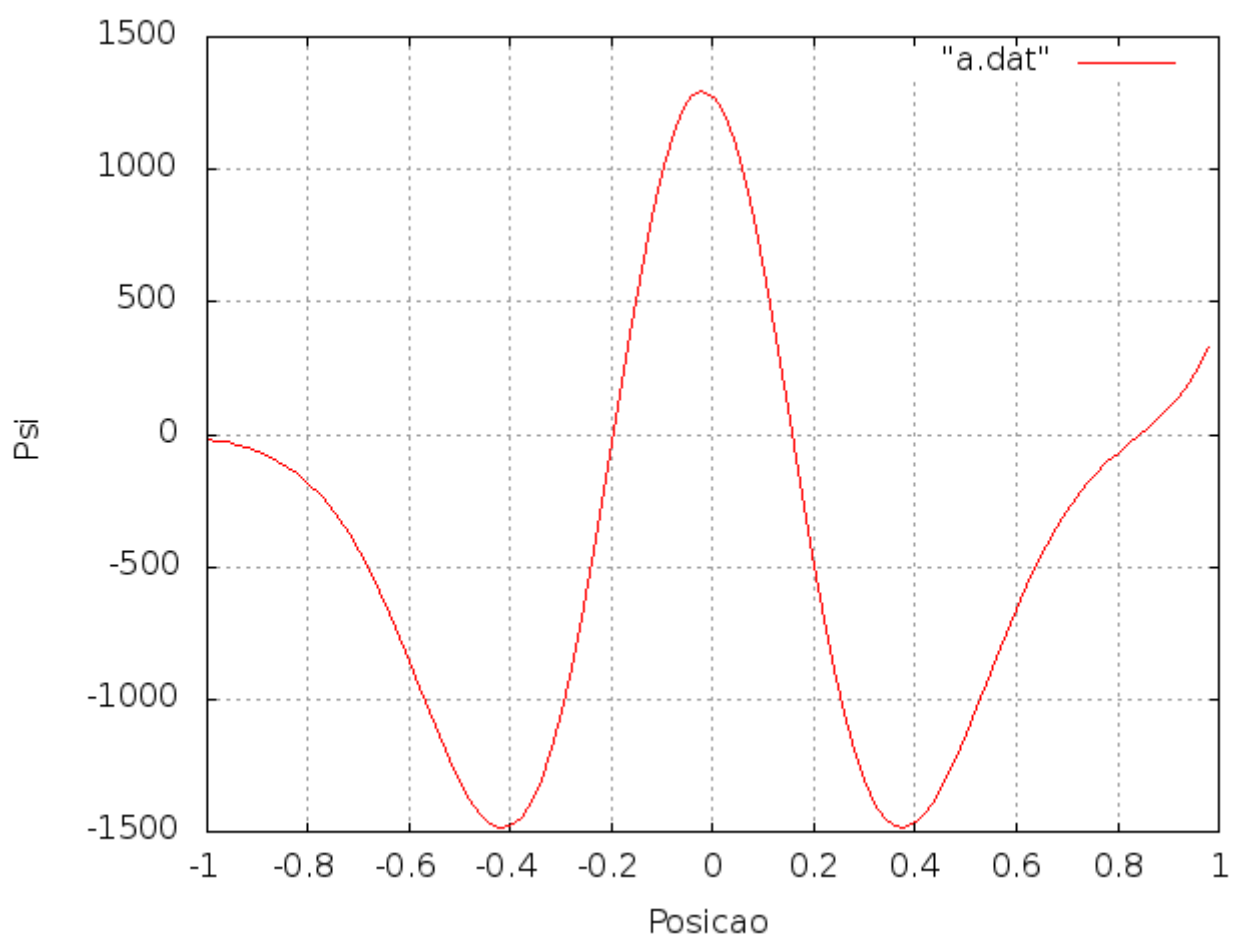


Para,

$$\psi_0 = \psi_1 = 1$$

e

$$\epsilon_3 = 80$$

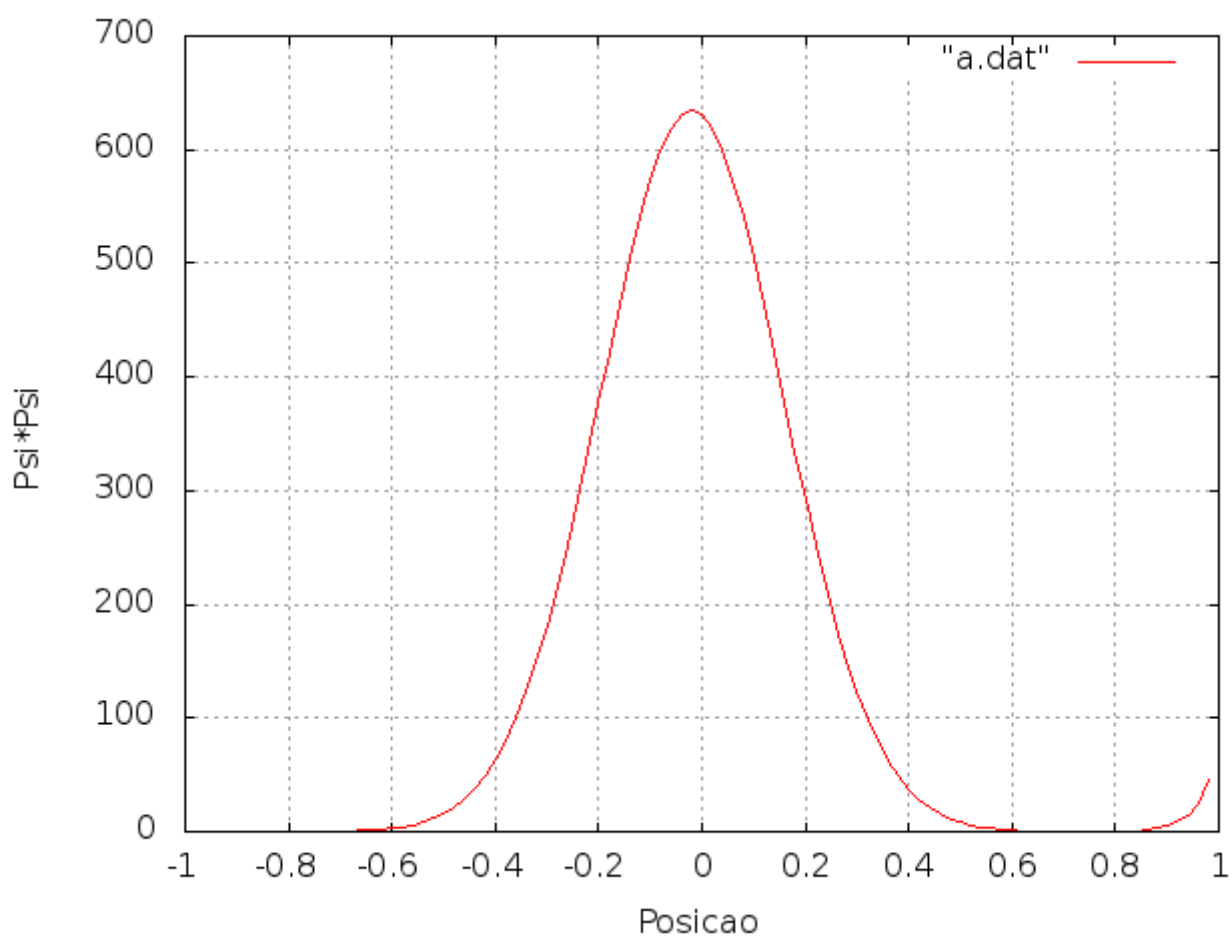




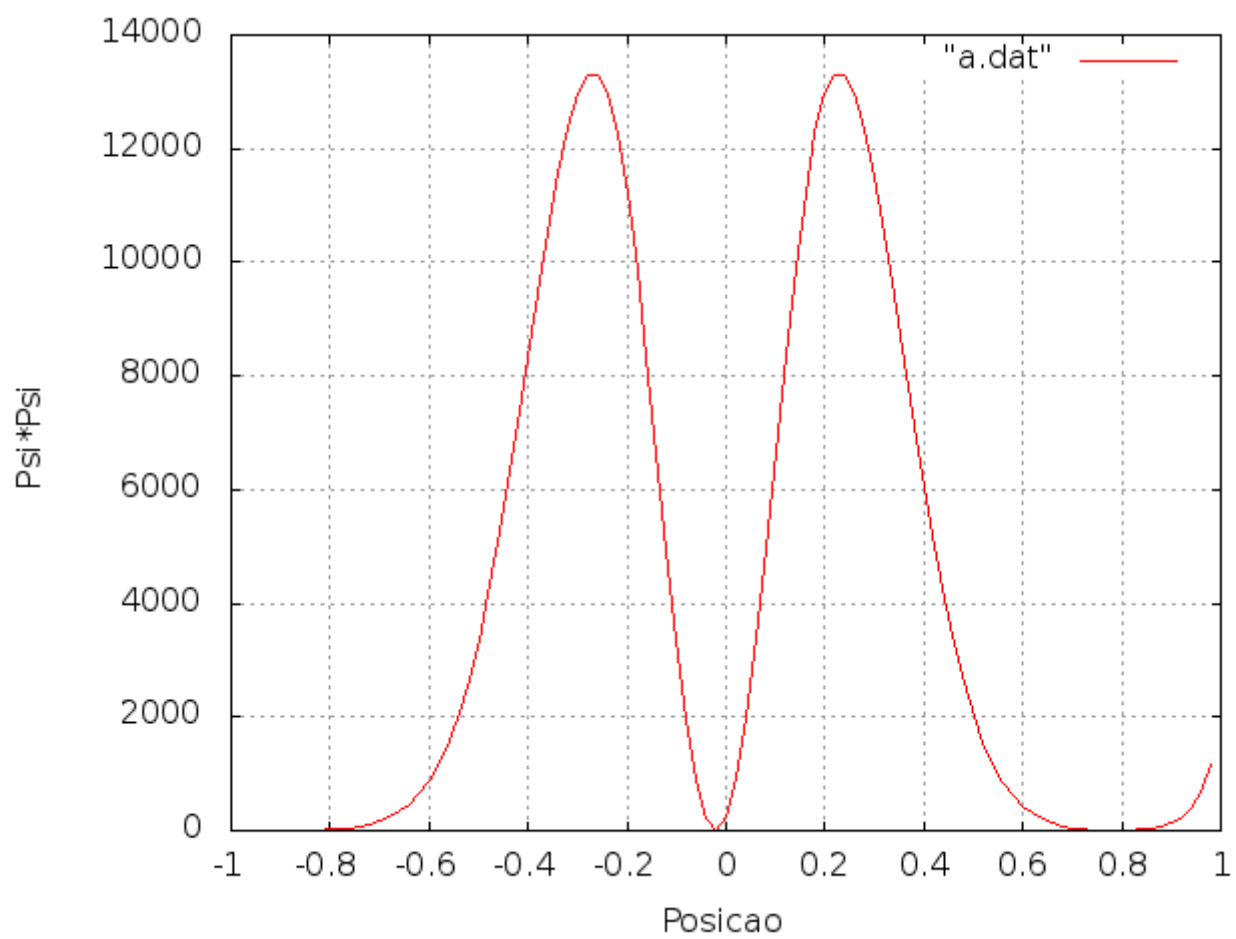
Podemos notar de interessante que se plotarmos as normalizadas podemos olhar as probabilidades de se encontrar as partículas em pontos, com condições de energia específicas.

Como em;

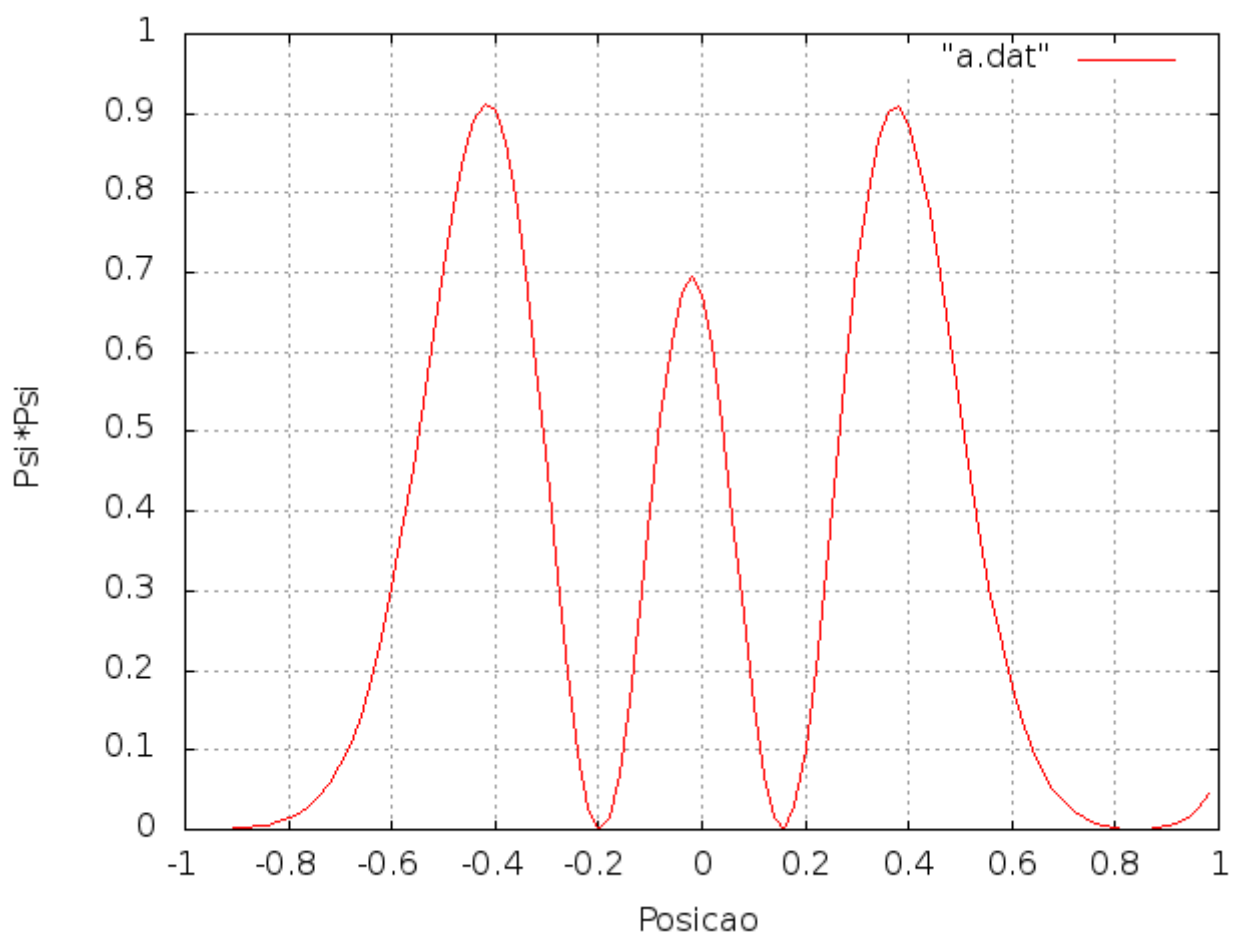
$$\epsilon_1 = 16$$



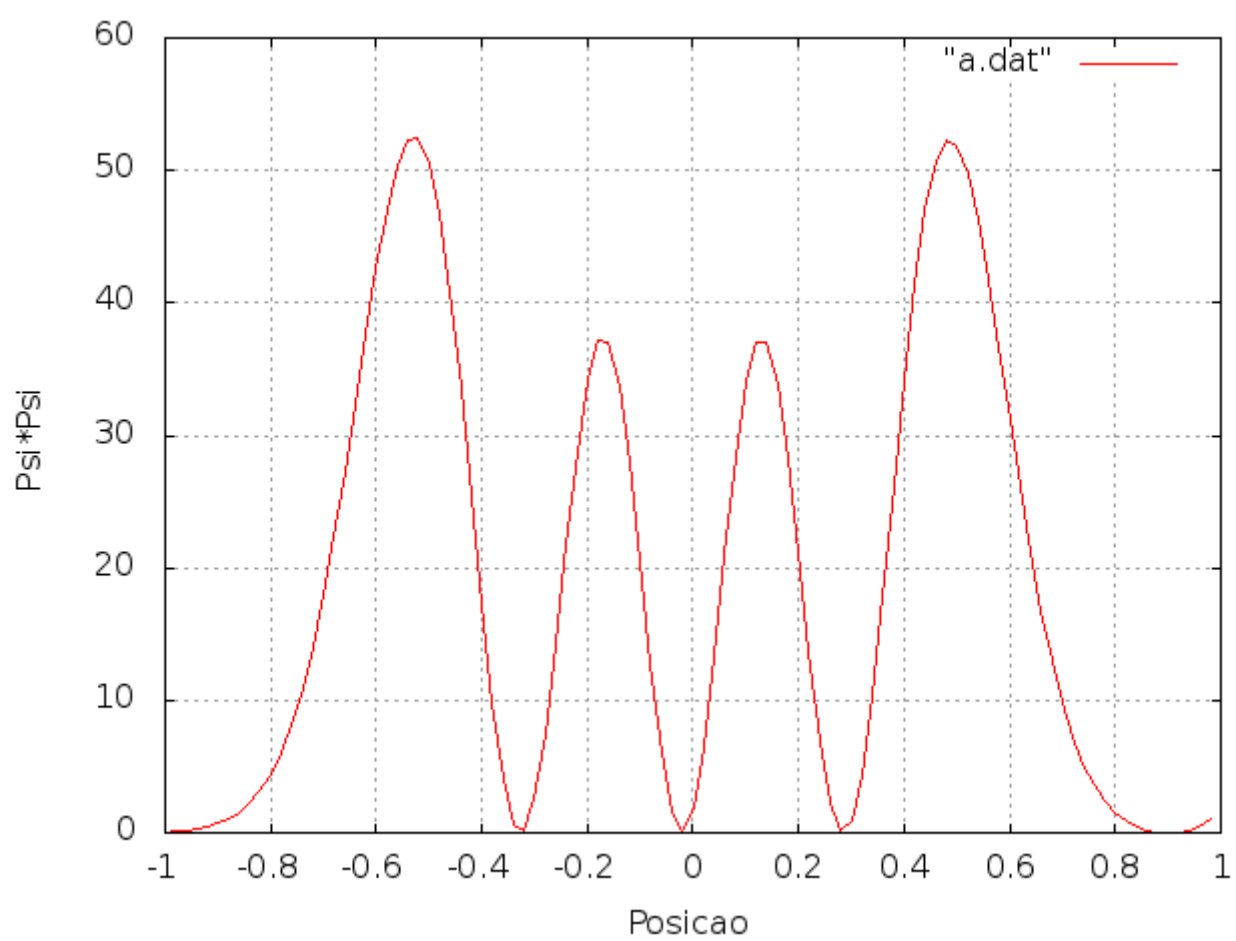
$$\epsilon_2=48$$



$$\epsilon_3=80$$



$$\epsilon_4=112$$



O código:

```
#include<stdio.h>
#include<math.h>

#define M 1e-30
#define A 1e-2// unidade de comprimento
#define h 6.582e-16 //Constante de Planck
#define K 0.03
#define pi 3.14159265
#define dx 2e-2 //H

double u(double x) // u -> unidade de medida (adimensional)
{
    return x/A;
}

double P(double x)
{
    return 256*x*x; // potencial harmonico
}

int main()
{
    double Psi[3], x, Ep,div;

    Ep = 112; // energia total
    div = 0;

    Psi[0]=0;
    Psi[1]=0.1;

    for(x=-1.0; x<1.0; x+=dx)
    {
        Psi[2] = (2 + dx*dx*(P(x) - Ep))*Psi[1] - Psi[0];
        div += Psi[1];

        Psi[0]=Psi[1];
        Psi[1]=Psi[2];
    }

    for(x=-1.0; x<1.0; x+=dx)
    {
        Psi[2] = (2 + dx*dx*(P(x) - Ep))*Psi[1] - Psi[0];

        printf("%.12f %.12f\n", x, /*/Psi[2]);*/(Psi[2]*Psi[2])/(div*div));

        Psi[0]=Psi[1];
        Psi[1]=Psi[2];
    }
}
```