

# Introdução a Métodos Computacionais em Física

## Módulo 9

Leonardo Cabral

1 de Novembro de 2019

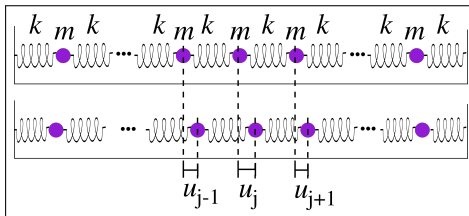


Equação de autovalores em sistemas físicos:

- ▶ Modos normais
- ▶ Equação de Schroedinger independente do tempo.

Mais informações sobre este assunto podem ser encontradas em:

- ▶ H. Gould, J. Tobochnik and W. Christian, "An Introduction to Computer Simulations Methods: Applications to Physical systems", 3<sup>rd</sup> Ed, Cap. 9.



$N$  partículas conectadas por molas

$$m \frac{d^2}{dt^2} u_j(t) = -k [u_j(t) - u_{j+1}(t)] - k [u_j(t) - u_{j-1}(t)] = k [u_{j+1}(t) + u_{j-1}(t) - 2u_j(t)]$$

Assume-se que resposta de cada partícula é periódica, com frequência angular  $\omega$ , i.e.,  $u_j(t) = u_j e^{i\omega t}$ . Logo,

$$-\omega^2 u_j = \frac{k}{m} [u_{j+1} + u_{j-1} - 2u_j].$$

A solução analítica deste problema ( $k$  e  $m$  iguais para todas as molas e massas) existe dadas as condições de contorno. Na seção 9.1 do Tóchnik é mostrada a solução para extremidades fixas ( $u_0 = 0 = u_{N+1}$ ).

### $N$ partículas conectadas por molas

Note que

$$\frac{k}{m} [2u_j - u_{j+1} - u_{j-1}] = \omega^2 u_j \rightarrow \mathbf{T} \cdot \mathbf{u} = \omega^2 \mathbf{u}$$

é uma equação de autovalores com autovetor  $\mathbf{u}$  e autovalor  $\lambda = \omega^2$ , que pode ser resolvida numericamente diagonalizando a matriz  $\mathbf{T}$ , cujos elementos (para o caso de massas e constantes elásticas não necessariamente iguais) são dados por:

$$T_{ij} = \begin{cases} (k_{i,i+1} + k_{i,i-1}) / m_i, & p/ i = j \\ -k_{i,i\pm 1} / m_i, & p/ i \pm 1 = j \\ 0, & \text{em outros casos} \end{cases}$$

As condições de contorno devem também ser inseridas. Por exemplo, se as extremidades são fixas,  $u_0 = 0 = u_{N+1}$ , enquanto que para condições de contorno periódicas,  $u_0 = u_N$  e  $u_1 = u_{N+1}$ . Já para extremidades livres,  $u_0 = u_1$  e  $u_N = u_{N+1}$ .



### $N$ partículas conectadas por molas

As condições de contorno definem equações ligeiramente diferentes para as partículas nas extremidades da cadeia (onde escrevemos  $k_{i,i+1} \rightarrow k_i$  e  $k_{i,i-1} \rightarrow k_{i-1}$ ):

- ▶ Extremidades fixas,  $u_0 = 0 = u_{N+1}$ :

$$\begin{aligned}(k_0 + k_1)u_1 - k_1u_2 &= \omega^2u_1 \\ -k_{N-1}u_{N-1} + (k_N + k_{N-1})u_N &= \omega^2u_N\end{aligned}$$

- ▶ condições de contorno periódicas,  $u_0 = u_N$  e  $u_1 = u_{N+1}$

$$\begin{aligned}(k_0 + k_1)u_1 - k_1u_2 - k_0u_N &= \omega^2u_1 \\ -k_Nu_1 - k_{N-1}u_{N-1} + (k_N + k_{N-1})u_N &= \omega^2u_N\end{aligned}$$

- ▶ Extremidades livres,  $u_0 = u_1$  e  $u_N = u_{N+1}$

$$\begin{aligned}k_1u_1 - k_1u_2 &= \omega^2u_1 \\ -k_{N-1}u_{N-1} + k_{N-1}u_N &= \omega^2u_N\end{aligned}$$



Elabore um relatório em pdf contendo seus resultados referentes ao itens abaixo:

- ▶ Elabore um programa em C/C++, Java ou Python para determinar os modos normais em uma cadeia com  $N$  partículas conectadas por molas. O problema de autovalores em C/C++ pode ser resolvido com o auxílio da biblioteca científica *Gnu Scientific Library (GSL)*.
- ▶ Resolva o problema de autovalores com valores de  $k$  e de  $m$  iguais para todas as massas e molas, inicialmente. Utilize condições de contorno (i) fixas, (ii) periódicas e (iii) livres.
- ▶ Para cada condição de contorno, mostre em gráficos o autovetor (i.e., o deslocamento  $u_j$  de cada partícula) para cada um dos autovalores. Escolha diferentes valores de  $N$ , desde  $N$  da ordem de unidades até  $N \sim 100$ . Quando possível, compare com resultados analíticos.
- ▶ O que você pode concluir dos resultados encontrados? O espectro de autovalores são os mesmos para diferentes condições de contorno? Justifique.
- ▶ Escolha uma condição de contorno e execute o seu programa com massas diferentes para cada partícula, mantendo um mesmo valor de constante elástica para todas as molas. Algumas sugestões são: massas diferentes alternadas; uma massa de valor muito diferente de todas as outras; utilizar uma distribuição estatística para as massas.
- ▶ Refaça o item anterior, com molas de constantes elásticas diferentes (pode, se quiser, deixar todas as partículas com a mesma massa).

## Operador laplaciano numérico e modos normais

Considere o operador  $\nabla^2$  (1D) atuando sobre uma função  $\psi$  e discretize a posição em intervalos discretos

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \doteq \frac{\left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{x+\Delta x/2} - \left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{x-\Delta x/2}}{\Delta x} = \frac{\psi(x+\Delta x) - 2\psi(x) + \psi(x-\Delta x)}{\Delta x^2}.$$

Esta discretização do laplaciano tem a mesma forma da matriz  $T$  obtida para os modos normais de a cadeia de partículas. Isto significa que os mesmos métodos utilizados para obter os modos normais podem ser usados para resolver problemas de autovalores envolvendo o operador laplaciano.

## Equação de Schroedinger independente do tempo

A equação de Schroedinger independente do tempo é dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(x)\psi(x) = E\psi(x),$$

onde  $E$  é um autovalor do operador hamiltoniano, designando a energia de um dado autoestado  $\psi$  e  $V(x)$  é um potencial.



## Equação de Schroedinger independente do tempo

Reescrevendo a equação de Schroedinger independente do tempo na forma adimensional – escolhendo uma unidade de comprimento,  $a$ , conveniente – temos

$$-\nabla^2 \psi + V(x)\psi(x) = E\psi(x),$$

onde  $x \rightarrow x/a$ ,  $V(x) \rightarrow 2ma^2V(x)/\hbar^2$  e  $E \rightarrow 2ma^2E/\hbar^2$ .

Utilizando a discretização para o laplaciano (1D), onde  $x_k = x_0 + k\Delta x$ ,  $\psi_k = \psi(x_k)$ ,  $V_k = V(x_k)$  teremos

$$-\frac{\psi_{k+1} + \psi_{k-1} - 2\psi_k}{\Delta x^2} + V_k\psi_k = E\psi_k \rightarrow \sum_{j=1}^N H_{kj}\psi_j = E\psi_k$$

$$H_{ij} = \begin{cases} 2\Delta x^{-2} + V_i, & \text{p/ } i = j \\ -\Delta x^{-2}, & \text{p/ } i \pm 1 = j \\ 0, & \text{em outros casos} \end{cases}$$





Elabore um relatório em pdf referente ao itens abaixo. Esboce gráficos para melhor apresentar seus resultados.

- ▶ Elabore um programa em C/C++, Java ou Python para obter soluções da equação de Schroedinger independente do tempo (ESIT).
- ▶ Considere um poço de potencial quadrado e resolva numericamente a ESIT. Seus resultados parecem razoáveis? Compare com a solução analítica (para um poço infinito). Para que autovalores as soluções numéricas e analíticas tem melhor concordância ou maior discrepância?
- ▶ Refaça o item anterior para um poço de potencial parabólico. Compare as autofunções obtidas com as soluções analíticas da ESIT.
- ▶ Teste outros potenciais, e.g., poço finito, barreira de potencial, etc. Descreva seus resultados. Estão de acordo com o que seria esperado?

