Física Computacional

2022/2023

23 de Maio de 2023

Universidade de Aveiro

Departamento de Física

Trabalho Prático de Avaliação Contínua

No seu relatório identifique cada alínea, caso contrário a mesma poderá não ser considerada

(15 valores)

Considere uma partícula de massa reduzida igual a 1, sujeita a um potencial não harmónico (a uma dimensão). A equação de Schrödinger independente do tempo é

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2\,\psi(x)}{d\,x^2} + V\,\psi(x) = E\,\psi(x) \qquad \text{com} \qquad V(x) = \frac{1}{2}\,\omega^2 x^2 + \lambda x^4$$

Considere $\omega = 3$ e $\lambda = 0.005$.

Como $V(x)$ tende para $+\infty$ quando $|x| \rightarrow \infty$, as condições fronteira são

$$\lim_{x\to-\infty} \psi(x) = 0, \qquad e \qquad \lim_{x\to+\infty} \psi(x) = 0$$

Para as soluções de energia mais baixa, o termo em x^4 vai ser mais pequeno que o termo em x^2. Pode escrever-se os valores próprios da energia como a soma dos valores do oscilador harmónico mais um termo que resulta da componente não harmónica.
Em unidades reduzidas, tem-se,

$$E_n = E_n^{harm} + \Delta E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\omega + \Delta E_n \qquad com \quad n = 0,1,2, \ldots \; .$$

a) (5 valores) Obtenha o valor próprio E_n para n = 3, usando o método de *shooting and matching*, em conjunto com os Métodos de Numerov.
Use o valor de E_n^{harm} para ajudar a escolher as estimativas iniciais do *shooting*. Normalize a função e represente $|\psi(x)|^2$.

b) (3 valores) Repita os cálculos usando um método de Runge-Kutta de 4ª ordem. Compare o desempenho dos dois métodos, quanto ao número de iterações e o tempo de cálculo. Varie o passo e a tolerância e apresente os resultados em forma de tabela.

c) (2.5 valores) Volte a usar o método da alínea a) e calcule os valores próprios para n= 0, 1, 2 e 4, assim com as respectivas funções próprias normalizadas. Represente as funções próprias numa única figura. Faça um gráfico do poço de potencial $V(x)$ e desenhe 5 linhas que indiquem as 5 energias próprias. Comente o resultado.

d) (2.5 valores) Faça um ajuste polinomial de ordem 2 dos 5 valores de ΔE_n que obteve na alínea anterior. Não o faça automaticamente, copie apenas para o código desta alínea os valores que vai obtendo na alínea c). Represente graficamente os seus valores de ΔE_n em conjunto com o ajuste polinomial. Comente. Compare com o resultado previsto pela teoria de perturbações de primeira ordem:

$$\Delta E_n^{(1)} = \frac{3}{4} \frac{\lambda}{\omega^2} (2n^2 + 2n + 1)$$

e) (2 valores) Em potenciais simétricos como este, as funções de onda só podem ser simétricas, $\psi(x) = \psi(-x)$, ou anti-simétricas, $\psi(x) = -\psi(-x)$. É possível obter a solução de uma maneira mais simples (*shooting* simples sem *matching*) só para metade do problema, obter os valores próprios da energia, e depois, se necessário, escrever a outra metade da função de onda. Estude o problema apenas para $x \leq 0$.
Obtenha o valor próprio mais baixo da energia correspondente a uma solução anti-simétrica, ou seja, com as seguintes condições fronteira:

$$\lim_{x \to -\infty} \psi(x) = 0, \qquad e \quad \psi(0) = 0$$

O resultado que vai obter deverá ser o mesmo que o E_1 da alínea c). Sabendo que neste caso $\psi(x) = -\psi(-x)$, represente graficamente a função de onda normalizada tanto para valores negativos como positivos de x.