

Resolução numérica da dinâmica no oscilador harmônico quântico

Projeto 4 - Métodos Computacionais em Física

Renan de Assis, NUSP: 9865401

Junho 2020

1 Introdução

1.1 Objetivos

Em aulas passadas foram exploradas situações da Mecânica Quântica nas quais foi resolvida a evolução temporal da equação de Schrödinger para uma partícula em uma dimensão. Nessas situações foi primeiramente utilizado um potencial nulo $V(x) = 0$ e depois analisado o caso de tunelamento com um potencial degrau do tipo

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & \text{se } x_1 \leq x \leq x_2 \\ 0, & \text{se } x < x_1 \text{ ou } x > x_2 \end{cases} \quad (1.1)$$

onde V_0 é um valor constante e x_1 e x_2 são os limites da barreira de potencial.

No contexto desse projeto iremos analisar o comportamento da função de onda unidimensional, $\Psi(x, t)$, sujeita a um potencial do tipo oscilador harmônico quântico.

A fim de introduzir um pouco da teoria do problema abordado, será dada uma breve explicação abaixo, a partir da referência [1].

1.2 Equação de Schrödinger

Na Mecânica Clássica, para determinar a posição, $x(t)$, de uma partícula de massa m que se move unidimensionalmente é aplicada a segunda lei de Newton, $F = ma$. Se estivermos a nível microscópico a Mecânica Clássica se torna inviável dando espaço à Mecânica Quântica, assim, ao invés de $x(t)$, nessa situação gostaríamos de determinar a função de onda, $\Psi(x, t)$, da partícula para uma dada posição x e um tempo t . Para isso é utilizada a equação de Schrödinger abaixo

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V\Psi(x, t) \quad (1.2)$$

onde temos i sendo a unidade imaginária, \hbar a constante de Planck, m a massa da partícula e V o potencial que age na mesma.

Ao contrário da Mecânica Clássica, a Mecânica Quântica é uma teoria probabilística e não determinante, assim, de acordo com a equação (1.3) abaixo, a função de onda nos fornece a probabilidade, $|\Psi(x, t)|^2$, de encontrar a partícula entre x_1 e x_2 no instante t

$$\int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (1.3)$$

Assim, se estendermos x_1 e x_2 para $-\infty$ e ∞ , respectivamente, teremos que a probabilidade de encontrarmos a partícula nesse intervalo no tempo t é de 100%. Formalizamos isso com a expressão

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (1.4)$$

Neste ponto, podemos voltar na equação (1.2) e afirmar que se $\Psi(x, t)$ é uma solução, então $A\Psi(x, t)$, com A sendo uma constante complexa, também é. Para determinar esse fator multiplicativo colocamos essa solução na equação (1.4), esse processo é chamado de normalização.

Além disso, normalmente gostaríamos de medir algumas propriedades (ou observáveis) para um certo sistema quântico. Essas observáveis são medidas através do cálculo do valor esperado de uma quantidade. O valor esperado é a média das medidas repetidas em um conjunto de sistemas preparados de uma maneira idêntica[1].

Temos que o valor esperado de x para uma partícula no estado Ψ é

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (1.5)$$

E ao invés da velocidade, em Mecânica Quântica, costumamos trabalhar com o momento de uma partícula, dado pela equação (1.6) abaixo.

$$\langle p \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt} = -i\hbar \int \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) dx \quad (1.6)$$

Neste momento, podemos reescrever as equações (1.6) e (1.5), omitindo os limites de integração por conveniência, para analisarmos de outra maneira

$$\langle x \rangle = \int \Psi^*(x) \Psi dx \quad (1.7)$$

$$\langle p \rangle = \int \Psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx \quad (1.8)$$

Assim, na Mecânica Quântica, dissemos que o observável x "representa" a posição e o observável $(\hbar/i)(\partial/\partial x)$ "representa" o momento, . Como qualquer variável dinâmica na Mecânica Clássica pode ser calculada a partir dos valores de x e p , podemos calcular o valor esperado de *qualquer* quantidade $Q(x, p)$ com a expressão abaixo

$$\langle Q(x, p) \rangle = \int \Psi^* Q \left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx \quad (1.9)$$

Outra observável que analisaremos será a observável E da energia. O valor esperado da energia E relacionada a um estado quântico descrito pela função de onda $\Psi(x, t)$ é dado por

$$\langle E \rangle = \int \Psi^* H \Psi dx \quad (1.10)$$

aqui temos o operador hamiltoniano H é dado por

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (1.11)$$

As expressões de valor esperado acima levam em conta que o estado $\Psi(x, t)$

está normalizado, caso contrário teremos que dividi-las pela equação (1.4).

1.3 Equação de Schrödinger independente do tempo

Como já introduzimos a função de onda e algumas de suas características na seção acima, podemos começar a discutir como obter $\Psi(x, t)$ na prática. Supondo que V é independente de t , precisamos resolver a equação de Schrödinger (1.2), para isso utilizaremos o método de separação de variáveis, separando a solução $\Psi(x, t)$ em uma parte dependente apenas de x e outra dependente apenas de t .

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t) \quad (1.12)$$

Colocando essa solução na equação de Schrödinger e dividindo os dois lados por $\psi\varphi$ temos

$$i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x) \quad (1.13)$$

Assim temos que o lado esquerdo da expressão é função apenas de t e o lado direito apenas de x . Isso só pode ocorrer se ambos forem iguais a uma constante, chamaremos essa constante de E . Assim teremos duas equações diferentes:

Uma para a parte temporal (equação 1.14) com solução dada pela equação (1.15)

$$\frac{d\varphi}{dt} = -\frac{iE}{\hbar}\varphi \quad (1.14)$$

$$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad (1.15)$$

E outra para a parte espacial (1.16)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi \quad (1.16)$$

essa equação acima é chamada equação de Schrödinger independente do tempo.

1.4 Oscilador harmônico quântico

Para resolver a equação de Schrödinger independente do tempo, é necessário especificar o sistema com um determinado potencial. Utilizaremos neste projeto o potencial de um oscilador harmônico quântico unidimensional, determinado pela expressão abaixo

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (1.17)$$

com m sendo a massa da partícula e ω sua frequência angular.

Assim, a equação de Schrödinger independente do tempo com o potencial do oscilador harmônico fica

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi = E\psi \quad (1.18)$$

Para resolvermos analiticamente esse problema primeiro precisamos reescrever a equação acima como

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - K)\psi \quad (1.19)$$

onde ξ é a variável adimensional dada pela equação (1.20) e K é a energia em unidades de $(1/2)\hbar\omega$ dado pela equação (1.21)

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \quad (1.20)$$

$$K \equiv \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (1.21)$$

Com um desenvolvimento o qual não é o foco do nosso projeto, mas pode ser visto detalhadamente nas páginas 39 à 44 da referência [1] utilizada como base para essa seção, chegamos aos estados estacionários normalizados para o oscilador harmônico em função dos polinômios de Hermite, $H_n(\xi)$.

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} \quad (1.22)$$

onde temos que n é o número quântico principal.

Além disso, as energias para cada ψ_n são dadas pela expressão abaixo

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \text{ para } n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.23)$$

Neste projeto estaremos focados em resolver a equação de Schrödinger *dependente* do tempo, entretanto como o que analisaremos são a densidade de probabilidade (equação 1.4) e algumas observáveis (equações 1.9 e 1.10), podemos ignorar a parte temporal da equação e focar apenas na parte espacial. Essa afirmação anterior é válida visto que como trabalharemos, no geral, com estados estacionários a dependência no tempo se cancela. Podemos visualizar isso para a densidade de probabilidade na equação (1.24) e da mesma forma para qualquer valor esperado como na equação (1.25).

$$|\Psi(x, t)|^2 = \Psi^* \Psi = \psi^* e^{+iEt/\hbar} \psi e^{-iEt/\hbar} = |\psi(x)|^2 \quad (1.24)$$

$$\langle Q(x, p) \rangle = \int \psi^* Q \left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi \, dx \quad (1.25)$$

1.5 Teorema de Ehrenfest

Provaremos também, computacionalmente, o Teorema de Ehrenfest (equações 1.26 e 1.27) que relaciona as derivadas temporais do valor esperado dos operadores posição e momento com o valor esperado da força em uma partícula com massa m se movendo em um campo escalar $V(x)$.

$$m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \langle p \rangle \quad (1.26)$$

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle = - \langle V'(x) \rangle \quad (1.27)$$

2 Descrição da simulação numérica

A partir da discussão na seção 1 vamos resolver numericamente a equação de Schrödinger para o oscilador harmônico quântico (equação 1.18) com os métodos abaixo.

2.1 Discretização e método de Euler

Para facilitar o cálculo computacional iremos separar a solução $\Psi(x, t)$, já que essa é uma função complexa, nas suas partes real e imaginária do seguinte modo

$$\Psi(x, t) = \mathcal{R}(x, t) + i\mathcal{I}(x, t) \quad (2.1)$$

onde $\mathcal{R}(x, t)$ e $\mathcal{I}(x, t)$ são funções reais.

Substituindo a expressão (2.1) acima na equação de Schrödinger (1.2) e separando em partes real e imaginária, obtemos um sistema de duas equações acopladas

$$\begin{cases} \hbar \frac{\partial \mathcal{R}(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \mathcal{I}(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\mathcal{I}(x, t) \\ \hbar \frac{\partial \mathcal{I}(x, t)}{\partial t} = \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \mathcal{R}(x, t)}{\partial x^2} - V(x)\mathcal{R}(x, t) \end{cases} \quad (2.2)$$

onde $V(x)$ é o potencial do oscilador harmônico quântico (equação 1.17).

Considerando $\hbar = m = 1$, temos que as equações acima se tornam

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathcal{R}(x, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{I}(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\mathcal{I}(x, t) \\ \frac{\partial \mathcal{I}(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{R}(x, t)}{\partial x^2} - V(x)\mathcal{R}(x, t) \end{cases} \quad (2.3)$$

A fim de resolver computacionalmente o problema, precisamos discretizar as variáveis x e t da seguinte forma

$$\begin{aligned} x_i &= (i - 1)\Delta x \\ t_n &= (n - 1)\Delta t \end{aligned} \quad (2.4)$$

com Δx o passo da posição, Δt o passo temporal, além de ser $i = 1, 2, \dots, N_x$ e $n = 1, 2, \dots, N_t$, sendo N_x e N_t os últimos índices dos valores discretos de x e t , respectivamente.

Assim, para simplificar, mudaremos a notação das variáveis do sistema de equa-

ções (2.3) como

$$\begin{aligned} V(x_i) &\rightarrow V(i) \\ \mathcal{R}(x_i, t_n) &\rightarrow \mathcal{R}(i, n) \\ \mathcal{I}(x_i, t_n) &\rightarrow \mathcal{I}(i, n) \end{aligned} \quad (2.5)$$

Agora, aproximando as derivadas segundas do lado direito do sistema de equações (2.3) pelo método de Euler, temos

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \mathcal{R}}{\partial x^2} \approx \frac{\mathcal{R}(i+1, n) - 2\mathcal{R}(i, n) + \mathcal{R}(i-1, n)}{(\Delta x)^2} \\ \frac{\partial^2 \mathcal{I}}{\partial x^2} \approx \frac{\mathcal{I}(i+1, n) - 2\mathcal{I}(i, n) + \mathcal{I}(i-1, n)}{(\Delta x)^2} \end{cases} \quad (2.6)$$

Voltando para o sistema de equações (2.3), aproximando as derivadas temporais de \mathcal{R} e \mathcal{I} do lado esquerdo pelo método de Euler e substituindo as derivadas segunda em relação à posição pelas expressões obtidas no sistema de equações (2.6), obtemos as expressões abaixo

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{R}(i, n+1) - \mathcal{R}(i, n)}{\Delta t} = & -\frac{1}{2} \frac{\mathcal{I}(i+1, n) - 2\mathcal{I}(i, n) + \mathcal{I}(i-1, n)}{(\Delta x)^2} \\ & + V(i)\mathcal{I}(i, n) \end{aligned} \quad (2.7)$$

$$\frac{\mathcal{I}(i, n+1) - \mathcal{I}(i, n)}{\Delta t} = \frac{1}{2} \frac{\mathcal{R}(i+1, n) - 2\mathcal{R}(i, n) + \mathcal{R}(i-1, n)}{(\Delta x)^2} - V(i)\mathcal{R}(i, n) \quad (2.8)$$

Podemos também reescrever as equações acima como

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(i, n+1) = & \mathcal{R}(i, n) - \\ & r[\mathcal{I}(i+1, n) - 2\mathcal{I}(i, n) + \mathcal{I}(i-1, n)] + V(i)\mathcal{I}(i, n)\Delta t \end{aligned} \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(i, n+1) = & \mathcal{I}(i, n) + \\ & r[\mathcal{R}(i+1, n) - 2\mathcal{R}(i, n) + \mathcal{R}(i-1, n)] - V(i)\mathcal{R}(i, n)\Delta t \end{aligned} \quad (2.10)$$

onde temos r dado por

$$r = \frac{\Delta t}{2\Delta x^2} \quad (2.11)$$

Restringindo o valor de r para $r \leq 1$ podemos determinar Δx através da expressão

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\Delta t}{2r}} \quad (2.12)$$

As equações (2.9) e (2.10) são a resolução das partes real e imaginária da equação de Schrödinger utilizando o método de Euler.

Adicionalmente teremos que calcular algumas derivadas numericamente, para isso utilizaremos a seguinte expressão

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \quad (2.13)$$

sendo x uma variável genérica e h uma variação pequena que no nosso caso será o passo temporal ou da posição.

2.2 Método de Runge-Kutta 2ª ordem (RK2)

Gostaríamos de tratar do problema abordado com um método mais preciso, assim explicaremos o método de Runge-Kutta de 2ª ordem.

O método numérico de Runge-Kutta de 2ª ordem consiste em aprimorar o método de Euler, primeiramente, através da determinação de valores em meio passo para depois em um passo inteiro. Pelo método de Euler, nas equações (2.9) e (2.10) deduzidas anteriormente, uma vai utilizar o passo anterior calculado pela outra, entretanto para o método de Runge-Kutta de 2ª ordem calcularemos meio passo a cada vez para cada coordenada. Para isso, realizaremos esse as seguintes etapas explicadas abaixo.

1. Definimos o sistema de equações utilizado a partir das equações (2.9) e (2.10)

$$\begin{cases} \frac{d\mathcal{R}}{dt} = f_{\mathcal{R}}(\mathcal{R}(t), \mathcal{I}(t)) \\ \frac{d\mathcal{I}}{dt} = f_{\mathcal{I}}(\mathcal{R}(t), \mathcal{I}(t)) \end{cases} \quad (2.14)$$

onde definimos $f_{\mathcal{R}}(\mathcal{R}, \mathcal{I})$ e $f_{\mathcal{I}}(\mathcal{R}, \mathcal{I})$ como

$$\begin{aligned} f_{\mathcal{R}}(\mathcal{R}, \mathcal{I}) &= -r[\mathcal{I}(i+1, n) - 2\mathcal{I}(i, n) + \mathcal{I}(i-1, n)] + V(i)\mathcal{I}(i, n) \\ f_{\mathcal{I}}(\mathcal{R}, \mathcal{I}) &= r[\mathcal{R}(i+1, n) - 2\mathcal{R}(i, n) + \mathcal{R}(i-1, n)] - V(i)\mathcal{R}(i, n) \end{aligned} \quad (2.15)$$

2. Definimos as variáveis k_1^R e k_1^I , que representam a inclinação no início dos intervalos, a partir do sistema de equações acima.

$$\begin{aligned} k_1^R &= f_{\mathcal{R}}(\mathcal{R}(t), \mathcal{I}(t))\Delta t \\ k_1^I &= f_{\mathcal{I}}(\mathcal{R}(t), \mathcal{I}(t))\Delta t \end{aligned} \quad (2.16)$$

3. Calculamos os valores a meio-passo, utilizando k_1^R e k_1^I

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(t + \Delta t/2) &= \mathcal{R}(t) + k_1^R/2 \\ \mathcal{I}(t + \Delta t/2) &= \mathcal{I}(t) + k_1^I/2 \end{aligned} \quad (2.17)$$

4. Definimos as variáveis k_2^R e k_2^I , que representam a inclinação do ponto médio do intervalo, através dos valores a meio-passo calculados anteriormente

$$\begin{aligned} k_2^R &= f_{\mathcal{R}}(\mathcal{R}(t + \Delta t/2), \mathcal{I}(t + \Delta t/2))\Delta t \\ k_2^I &= f_{\mathcal{I}}(\mathcal{R}(t + \Delta t/2), \mathcal{I}(t + \Delta t/2))\Delta t \end{aligned} \quad (2.18)$$

5. Por fim atualizamos as partes real e imaginária de $\Psi(x, t)$ em um passo temporal, utilizando k_2^R e k_2^I

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(t + \Delta t) &= \mathcal{R}(t) + k_2^R \\ \mathcal{I}(t + \Delta t) &= \mathcal{I}(t) + k_2^I \end{aligned} \quad (2.19)$$

Esse é o método que utilizaremos para a resolução do problema abordado. Para isso iteramos seguindo essas etapas descritas acima percorrendo todo o intervalo de tempo especificado. Apesar disso, é necessário mencionar uma estratégia do cálculo computacional realizado que foi preciso calcular primeiramente todos os valores de k_1 e dos "meio-passos" em um primeiro laço temporal para, após isso, calcular em outro laço temporal os valores de k_2 e a atualização em um passo. Essa abordagem foi necessária visto que se tudo fosse calculado no mesmo laço temporal existiriam valores ainda não definidos que seriam utilizados equivocadamente.

2.3 Método de Integração - Regra 1/3 de Simpson

Para realizar o cálculo das observáveis teremos que integrar algumas variáveis, entretanto, computacionalmente falando, não conseguimos calcular integrais exatamente, para isso precisamos de aproximações.

Inicialmente temos que a integral de uma variável é a área embaixo da curva de uma função. Como não conseguimos calcular exatamente a área de uma curva contínua e "arredondada" temos que discretizar essa área em intervalos igualmente espaçados com formas mais simples para que, a partir disso, seja obtida uma aproximação para a integral.

O método mais simples que poderíamos pensar é a Regra do trapézio que aproxima cada intervalo para um trapézio e a integral seria a soma da área de todos esses polígonos pertencentes ao intervalo. Neste projeto, utilizaremos um método um pouco mais preciso que se chama Regra 1/3 de Simpson.

A Regra 1/3 de Simpson não utiliza mais trapézios para aproximar seus intervalos, mas sim realiza uma aproximação parabólica a cada três pontos, isso deixa a curva um pouco mais próxima à original. Nessa Regra precisamos, primeiramente, somar a função f no primeiro valor x_1 e no último valor x_N de acordo com a equação 2.20 abaixo.

$$S = f(x_1) + f(x_N) \quad (2.20)$$

Após isso avaliamos os valores intermediários entre o primeiro e o último valor de acordo com as condições abaixo

$$S = \begin{cases} S + 4f(x_i), & \text{se } i \text{ é par} \\ S + 2f(x_i), & \text{se } i \text{ é ímpar} \end{cases} \quad (2.21)$$

Somamos em todos os valores intermediários e por fim multiplicamos pelo valor do espaçamento de cada intervalo (Δx) dividido por 3.

$$\int_{x_1}^{x_N} f(x) dx \approx \frac{\Delta x}{3} S \quad (2.22)$$

Isso nos dará a aproximação da integral pela Regra 1/3 de Simpson.

3 Análise dos resultados

Descritos os métodos numéricos utilizados, iremos analisar as simulações e resultados feitos.

3.1 Análise para $\Psi(x, 0)$

Antes de considerar a parte da dinâmica no oscilador harmônico, trataremos primeiramente da análise da função de onda no tempo $t = 0$.

Na análise de todas as simulações dessa e das próximas seções foi utilizado um valor específico para os seguintes parâmetros:

- Massa: $m = 1$;
- Constante de Planck: $\hbar = 1$;
- Passo temporal: $dt = 10^{-4}$;
- Constante r (equação 2.11): $r = 0.075$;
- Passo espacial: dado pela equação 2.12;
- Intervalo da posição: $-1 \leq x \leq 1$;
- Frequência angular: $\omega = 50$

Esses valores foram escolhidos considerando unidades arbitrárias e o valor de r e dt foram sugeridos em tarefas passadas da matéria, esses serão analisados com mais detalhes posteriormente.

Inicialmente iremos analisar a função de onda $\Psi(x, 0)$ com a condição inicial $\psi_0(x)$ do estado fundamental. Essa condição inicial é dada pela equação 1.22 especificando o número quântico principal sendo $n = 0$, assim temos que $\psi_0(x)$ é dado por

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad (3.1)$$

onde temos m sendo a massa da partícula, ω a frequência angular e \hbar a constante de Planck.

A forma da função de onda $\Psi(x, 0)$ com a condição inicial $\psi_0(x)$, juntamente com a representação do poço elíptico de potencial do oscilador harmônico, são mostrados na Figura 1

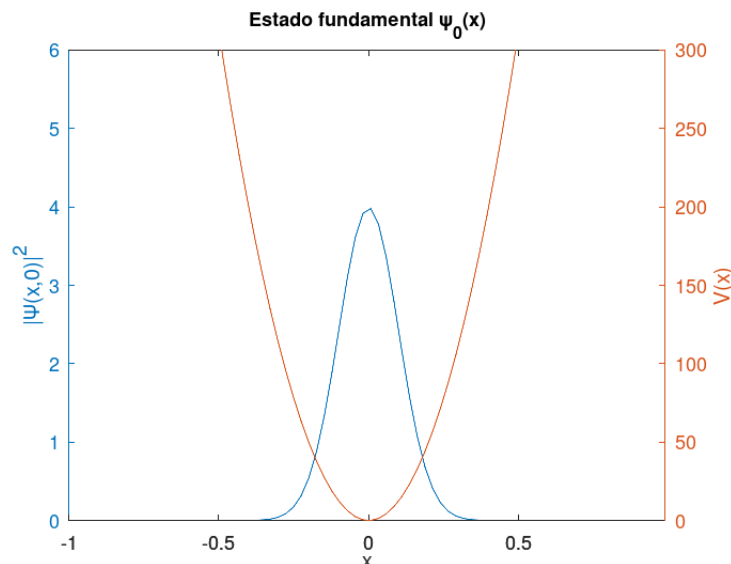


Figura 1: Estado fundamental da partícula em $t = 0$

Após isso calculamos o valor esperado da energia (equação 1.10) e dividindo pela densidade de probabilidade (equação 1.4) para normalizar, temos que a energia obtida foi de $\langle E \rangle = 24.948$. A energia do estado fundamental é dada pela equação 1.23

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega = 25 \quad (3.2)$$

Comparando a energia exata acima com a obtida pelo nosso cálculo temos que as duas são bem próximas com variação apenas a partir da segunda casa decimal. Agora, caso alteremos o valor do passo temporal para $dt = 10^5$ o valor esperado da energia calculado é $\langle E \rangle = 24.995$, mais preciso ainda. Uma observação a ser feita é que devido aproximações computacionais a parte imaginária do valor esperado da energia não é exatamente nula, entretanto o valor é extremamente pequeno (na ordem de 10^{-15}) e por isso é desconsiderado.

Também foi analisada a função de onda utilizando como condição inicial a solução da parte espacial do oscilador harmônico para os dois primeiros estados

excitados. A partir da equação 1.22 e especificando o número quântico principal, temos a solução para o primeiro estado excitado (equação 3.3) e para o segundo estado excitado (equação 3.4)

$$\psi_1(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \quad (3.3)$$

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \left(\frac{2m\omega}{\pi\hbar} x^2 - 1\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \quad (3.4)$$

Com isso calculamos a forma do primeiro estado excitado ($\psi_1(x)$), representada na Figura 2, e a do segundo estado excitado ($\psi_2(x)$), representada na Figura 3, juntamente a representação do poço elíptico de potencial do oscilador harmônico.

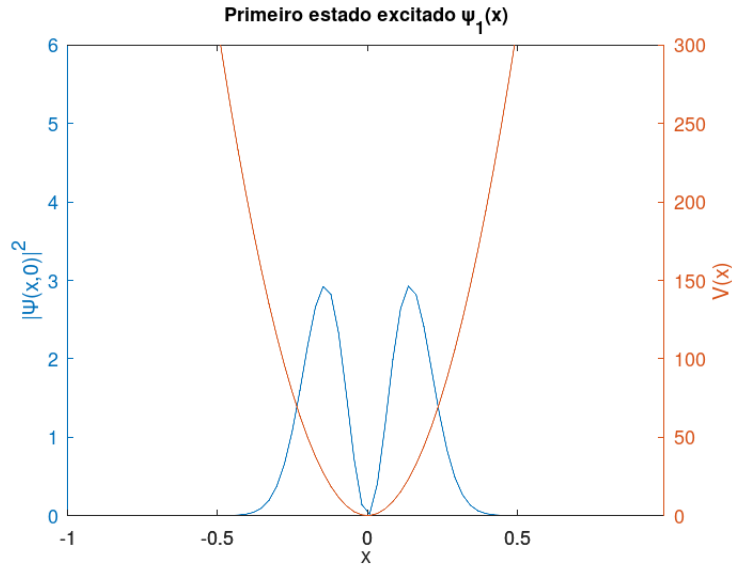


Figura 2: Primeiro estado excitado da partícula em $t = 0$

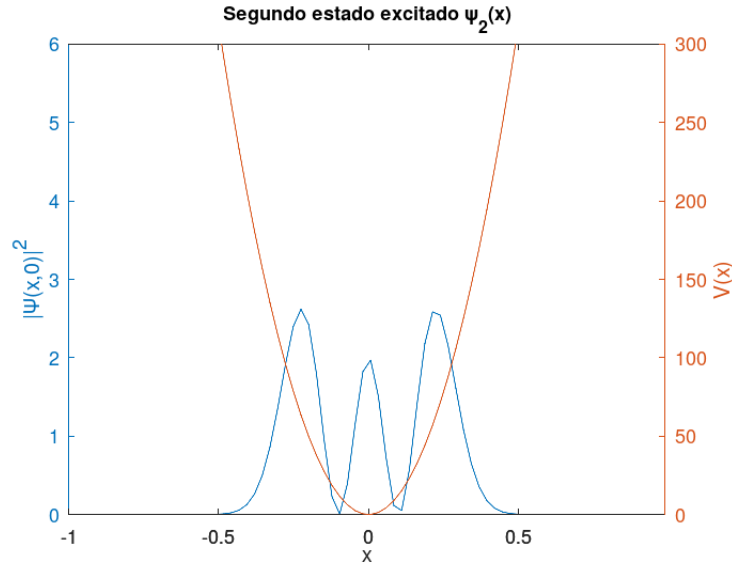


Figura 3: Segundo estado excitado da partícula em $t = 0$

Além disso também foram analisadas as energias obtidas, com $dt = 10^{-4}$ e $dt = 10^{-5}$, comparando-as com as energias originais. Esse resultado é mostrado na tabela 3.1

	Teórica	Calculada ($dt = 10^{-4}$)	Calculada ($dt = 10^{-5}$)
E_1	75	74.741	74.974
E_2	125	124.33	124.93

Tabela 3.1: Tabela de comparação das energias do 1º e 2º estados excitados com seus valores calculados

Como visto na tabela acima, os valores obtidos são próximos dos teóricos, ainda mais quando colocamos um passo temporal menor.

3.2 Evolução temporal de $\Psi(x, t)$

Nessa seção iremos analisar a evolução temporal do estado $\Psi(x, t)$, para isso foi utilizado um intervalo de tempo de $0 \leq t \leq 0.05$. Iniciando com qualquer uma das condições iniciais explicitadas acima, conforme evoluímos $\Psi(x, t)$ no tempo, a função de onda permanece no mesmo lugar que inicialmente, então nada *acontece*.

Isso ocorre porque estamos tratando de estados estacionários e a densidade de probabilidade da função de onda não depende do tempo.

Para isso podemos até colocar, representativamente, a normalização da função de onda em função do tempo (Figura 4) com condição inicial $\psi_0(x)$. O valor da normalização ficou bem próximo de 1 variando apenas um pouco a partir da nona casa decimal.

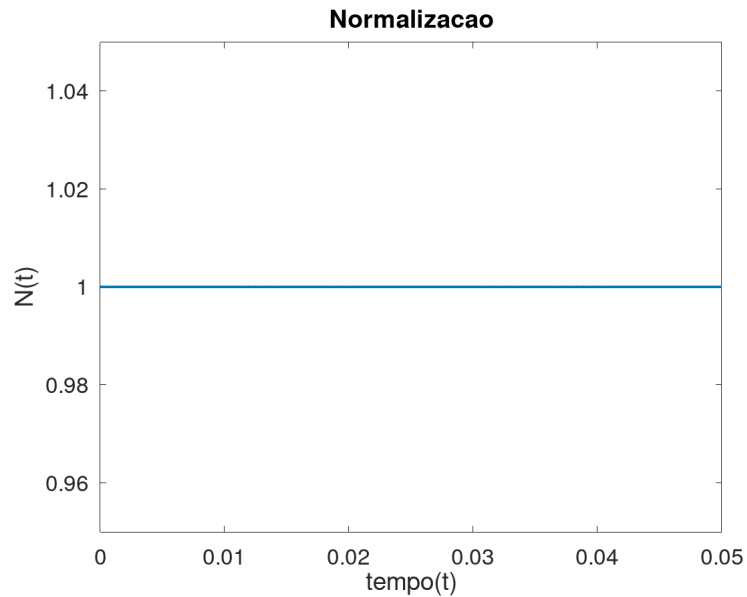


Figura 4: Normalização do estado fundamental ao longo do tempo

Além disso, também temos a variação do valor esperado da energia ao longo do tempo para essa mesma condição inicial, representada na Figura 5

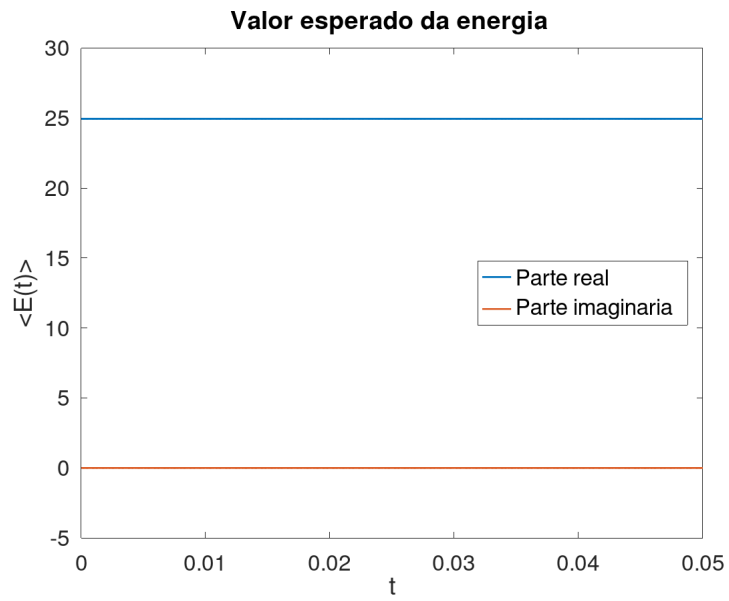


Figura 5: Valor esperado da energia do estado fundamental ao longo do tempo

Agora se trocarmos a condição inicial para um estado não estacionário, por exemplo com a curva da função de onda deslocada 0.2 para a esquerda, temos que a função de onda no tempo $t = 0$ é representada pela Figura 6a e no tempo final pela Figura 6b.

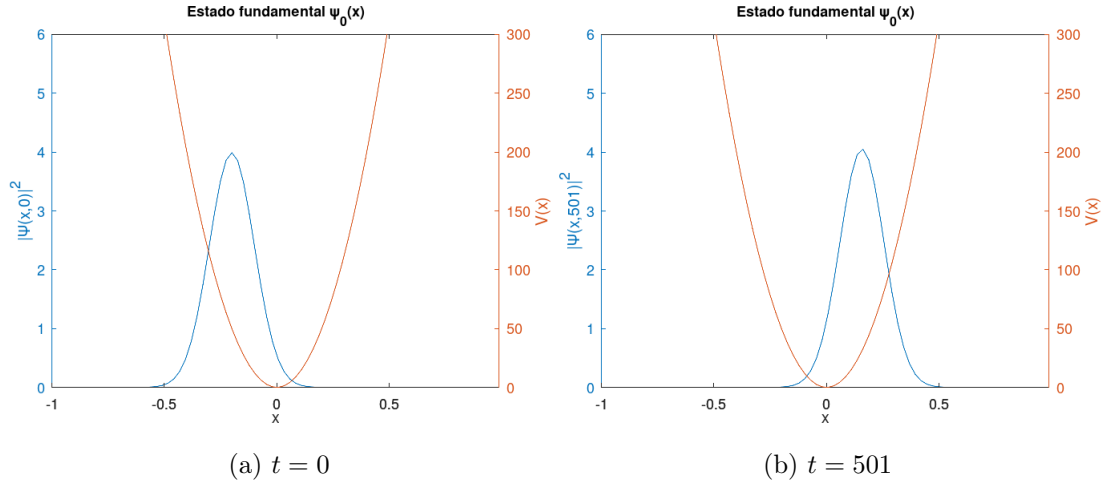


Figura 6: Função de onda Ψ com a condição inicial deslocada

3.3 Discussão dos valores dos parâmetros

Como foi falado na seção 3.1, agora analisaremos a escolha dos valores para alguns parâmetros das simulações. Usaremos como exemplo a simulação com $t = 0$ e condição inicial $\psi_0(x)$.

A alteração do passo temporal influencia na precisão dos valores esperados, como mostrado na Tabela 3.1, e na forma da função de onda, tornando-a mais contínua. Isso pode ser visualizado na comparação das imagens na Figura 7.

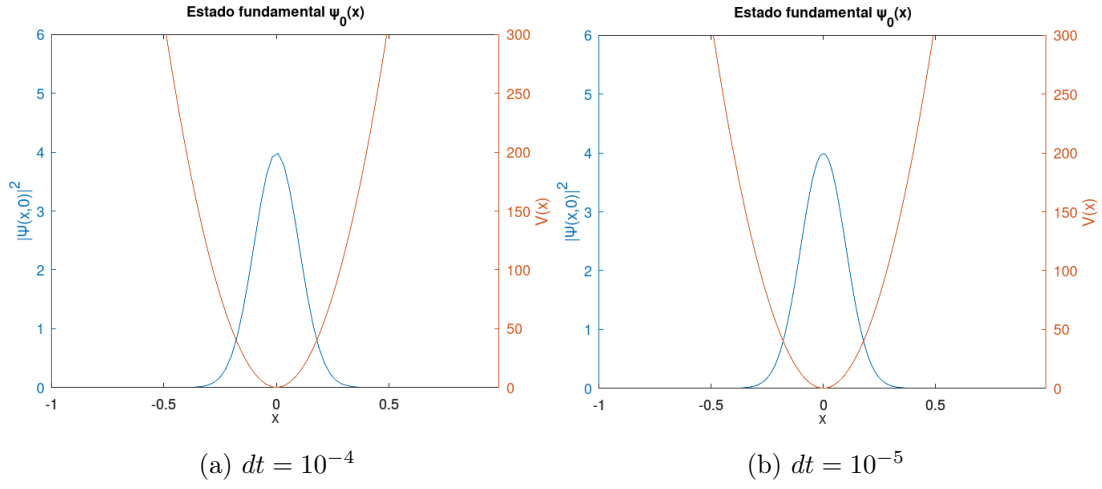


Figura 7: Forma da função de onda do estado fundamental para diferentes passos temporais

A alteração do valor da constante r provoca uma variação nos valores da normalização e do valor esperado da energia ao longo do tempo. Com um valor de r em $r = 0.185$, obtivemos uma alteração na função de onda no tempo final (Figura 8)

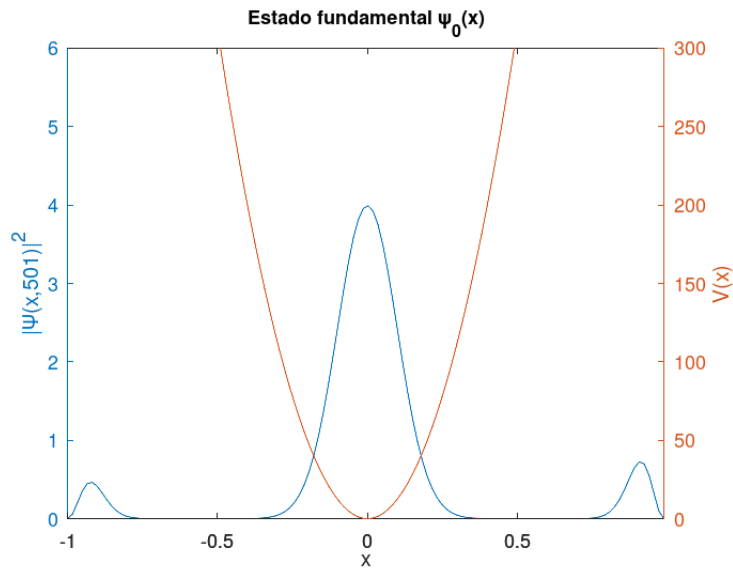


Figura 8: Função de onda Ψ com $r = 0.185$

Além disso, temos que no fim da simulação o valor esperado da energia e a normalização também se alteraram, isso mostrado na Figura 9 abaixo.

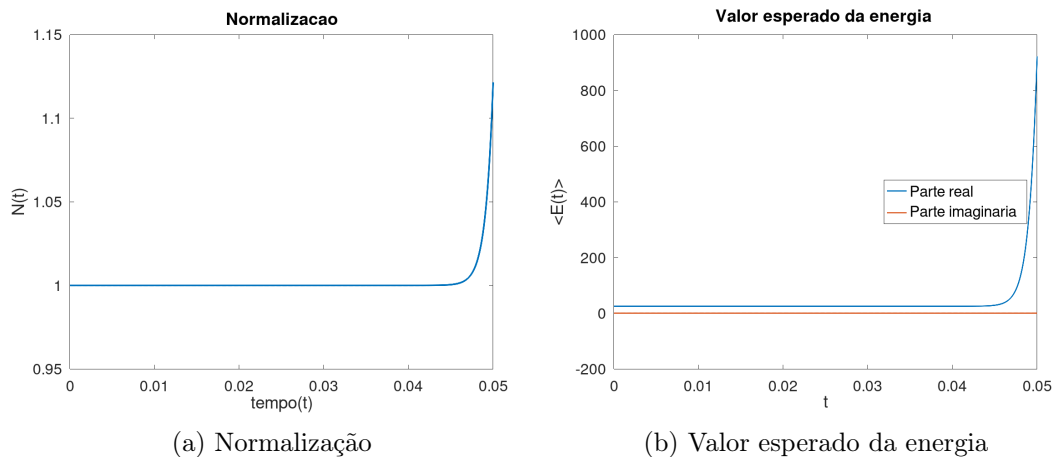


Figura 9: Valor esperado da energia e normalização para $r = 0.185$

Com esses valores de r e dt analisados, vemos que os valores usados na seção 3.1 foram os que melhor se adequaram no sentido de otimização do tempo hábil e dos resultados.

3.4 Condição inicial com onda plana

Realizamos também a análise da dinâmica no oscilador harmônico com uma condição inicial diferente das utilizadas até agora, uma com a solução para o estado fundamental $\psi_0(x)$ multiplicada por uma onda plana com a forma e^{ik_0x} , assim como na equação 3.5 abaixo.

$$\Psi(x, 0) = \psi_0(x)e^{ik_0x} \quad (3.5)$$

onde k_0 é o número de onda, foi utilizado um valor de $k_0 = 15$ neste projeto.

Essa condição não altera a forma da função de onda inicial comparando como se tivesse apenas ψ_0 , isso mostrado na Figura 10a. Entretanto essa onda plana adicionada na condição inicial inclui um momento no nosso sistema que faz com

que a função de onda termine na posição dada pela Figura 10b.

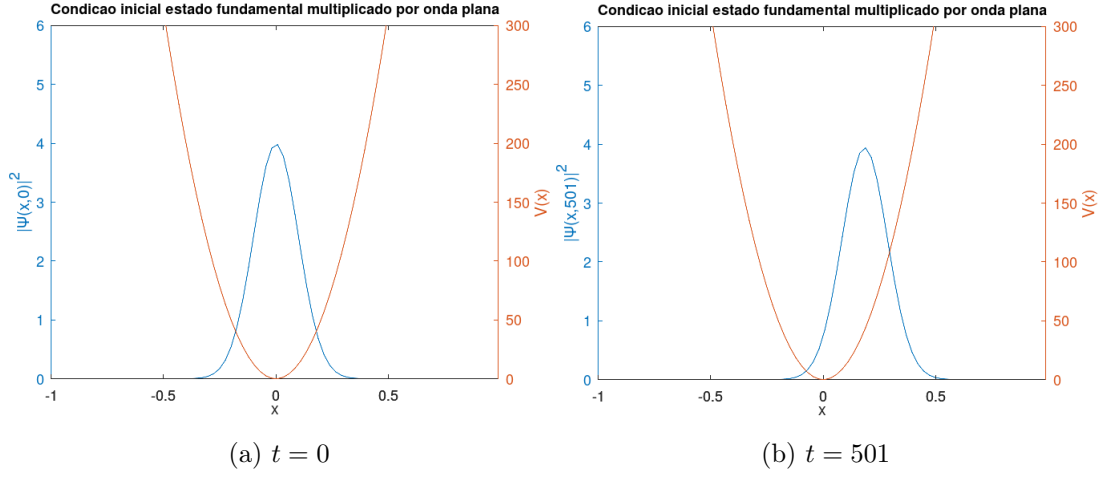


Figura 10: Função de onda com condição inicial

$$\Psi(x, 0) = \psi_0(x)e^{ik_0x}$$

Com essa condição inicial também são alterados o valor da normalização ao longo do tempo (Figura 11a) e o valor esperado da energia $\langle E \rangle$ com a parte real sendo $\langle E \rangle = 135.13$, visto na Figura 11b.

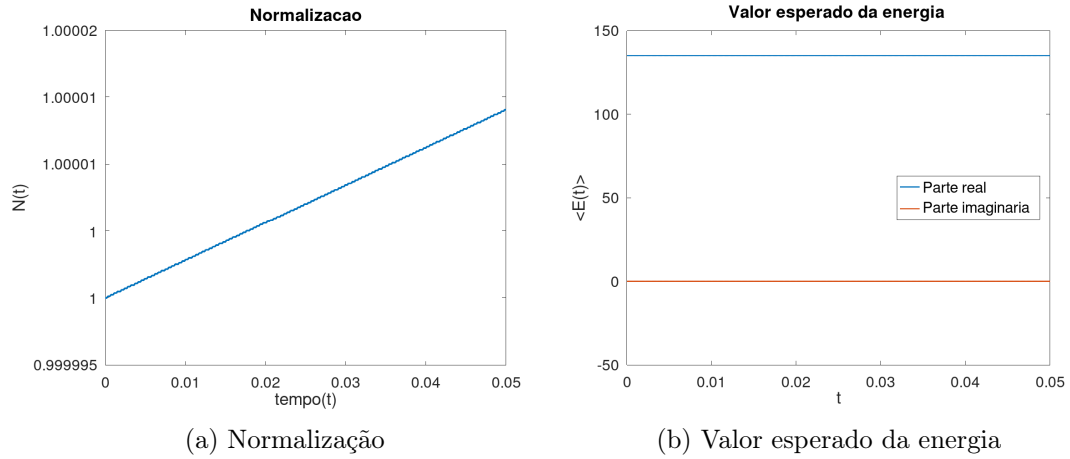


Figura 11: Valor esperado da energia e normalização para a condição inicial $\psi_0(x)e^{ik_0x}$

Como temos um momento adicional no sistema é compreensível que a energia do sistema aumente e isso também altera, mesmo que a partir da quinta casa decimal, o valor da normalização ao longo do tempo.

Foi feita também uma simulação com o intervalo de tempo de $0 \leq t \leq T$, sendo $T = 2\pi/\omega$ o período de oscilação. Isso mostrado na Figura 12.

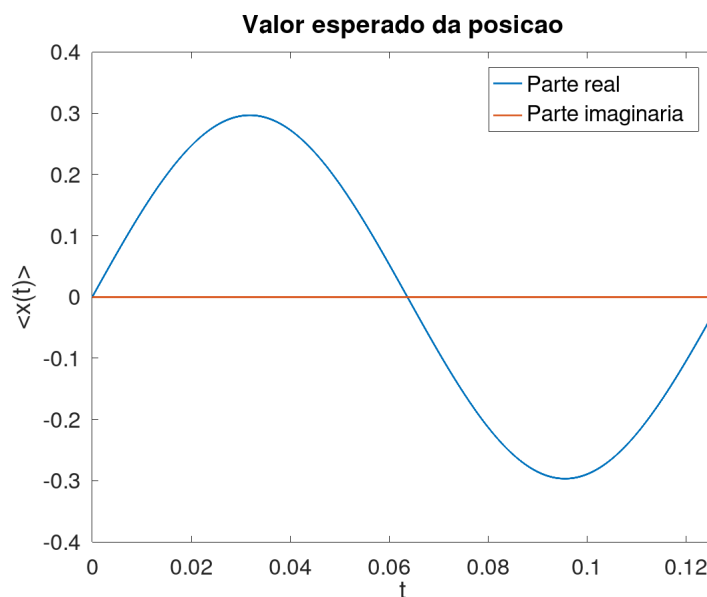


Figura 12: Valor esperado da posição ($\langle x \rangle$) para um período de oscilação

3.5 Verificação do Teorema de Ehrenfest

Para verificarmos a primeira parte do Teorema de Ehrenfest (equação 1.26) iremos ter que calcular o valor esperado da posição ($\langle x \rangle$) para depois sua derivada temporal ($d\langle x \rangle / dt$) e o valor esperado do momento da partícula ($\langle p \rangle$). Com a simulação desses resultados iremos utilizar um intervalo de tempo de $0 \leq t \leq T$, sendo $T = 2\pi/\omega$ o período de oscilação.

Calculamos o valor esperado de x usando a equação 1.7 e o valor esperado de p (equação 1.8) usando a derivação em relação a x a partir da equação 2.13 que essa também foi usada a fim de calcular a derivada temporal de $\langle x \rangle$. Assim, para verificar a validade da primeira parte do Teorema foi feito um gráfico comparando os dois valores (lembrando que temos $m = 1$), mostrado na Figura 13.

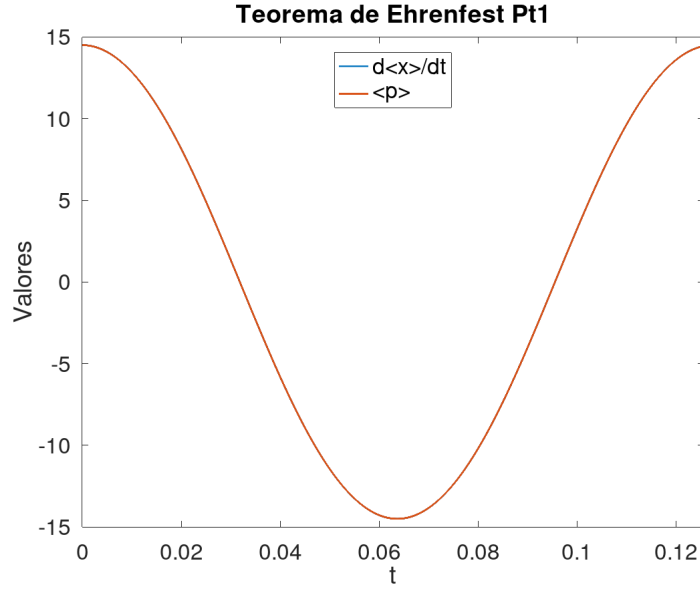


Figura 13: $md\langle x\rangle/dt$ e $\langle p\rangle$ durante um período de oscilação

Na Figura acima só é possível ver a curva de $\langle p\rangle$, isso por que a curva de $d\langle x\rangle/dt$ está sobreposta, indicando que ambas estão suficientemente próximas, confirmando a primeira parte do Teorema de Ehrenfest.

Com $dt = 10^{-5}$ muda só na quinta casa decimal, mas o gráfico permanece o mesmo.

Para analisar a segunda parte do Teorema de Ehrenfest (equação 1.27) precisamos da derivada temporal do valor esperado do momento ($d\langle p\rangle/dt$) e do valor esperado do derivada do potencial do oscilador harmônico, esse calculado analiticamente sendo

$$V' = m\omega^2 x \quad (3.6)$$

Seu valor esperado foi calculado usando a expressão 1.9. Com essas grandezas calculadas fizemos um gráfico comparando os dois valores, isso mostrado na Figura 14

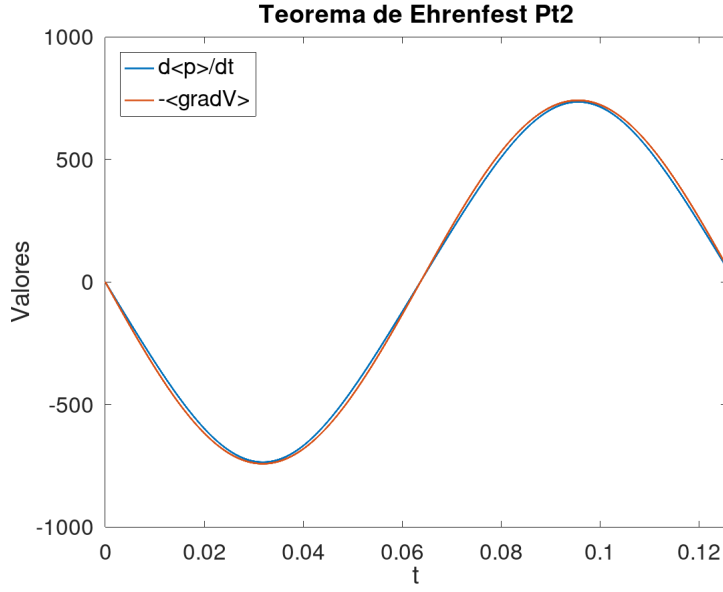


Figura 14: $d\langle p \rangle / dt$ e $\langle V' \rangle$ durante um período de oscilação com $dt = 10^{-4}$

É possível ver que as curvas não estão exatamente sobrepostas, analisando os valores em si temos que há uma variação grosseira chegando até na casa das dezenas, isso provavelmente devido erros numéricos de aproximação, entretanto se diminuirmos o passo temporal para $dt = 10^{-5}$ os valores mudam em média até a segunda casa decimal. Podemos verificar isso graficamente na Figura 15

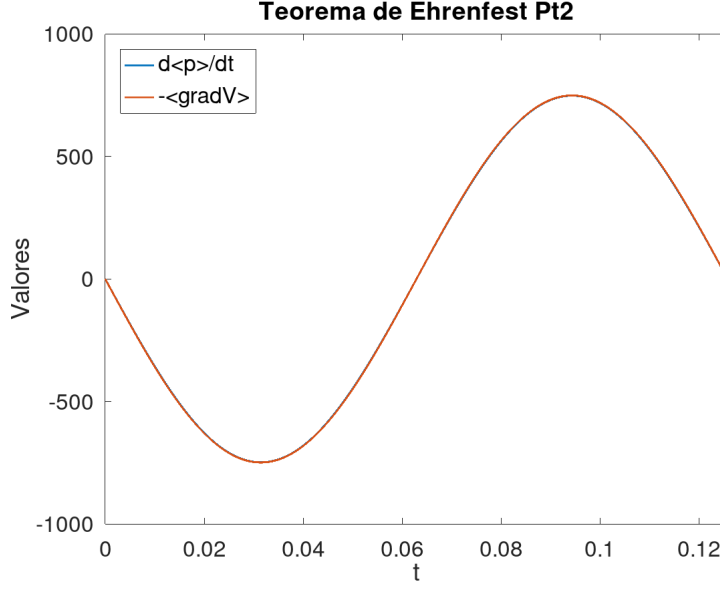


Figura 15: $d\langle p \rangle / dt$ e $\langle V' \rangle$ durante um período de oscilação com $dt = 10^{-5}$

Como podemos ver na Figura acima as curvas agora se sobrepõem e isso confirma a segunda parte do Teorema de Ehrenfest.

4 Manual do usuário para o *script*

Para a resolução numérica do problema da dinâmica no oscilador harmônico quântico foi feito um *script* com o *software* Octave[2].

Primeiramente foram criadas duas funções para auxiliar na compreensão do código.

psi_n(n,m,w,h,x) - Essa função utiliza o número quântico principal (n), a massa da partícula (m), a frequência de oscilação (w), o valor da constante de Planck (h) e um vetor com as posições (x) para retornar uma das soluções do oscilador harmônico com n variando de 0 até 2.

integracao_13simpson(f,dx,t,inicio,fim) - Essa função utiliza o vetor (f) a ser usado como integrando, o passo espacial (dx), o instante temporal (t) e os limites de integração (*inicio* e *fim*) para retornar o valor da integral pela regra 1/3 de Simpson (equação 2.22).

A partir da definição das funções temos algumas seções explicadas abaixo:

Definições iniciais - Aqui definimos as constantes que utilizaremos ao longo do código. Elas são a frequência de oscilação w , o período T , o passo e o intervalo de tempo, a constante r , o passo e o intervalo de posições, a massa m da partícula, a constante de Planck h , a constante k_0 de ondas planas, o estado que queremos de ψ_n e se queremos que seja adicionada uma onda plana da condição inicial. Essa é a única seção do código que podem ser alteradas quase todas as variáveis, exceto a definição dos vetores tempo e posição.

Definição da função de onda - Aqui definimos o vetor da função de onda, o potencial do oscilador harmônico e o gradiente desse potencial.

Condição inicial e de contorno - Aqui definimos a condição inicial, verificando se utilizaremos a adição de uma onda plana nela ou não, e as condições de contorno.

Partes real e imaginária da função de onda - Aqui separamos as partes real e imaginária da função de onda e definimos os vetores auxiliares para o cálculo do meio passo no método de Runge-Kutta.

Cálculo de $\text{Re}(\Psi)$ e $\text{Im}(\Psi)$ - Aqui é utilizado o método de Runge-Kutta para o cálculo da evolução temporal da função de onda.

Redefinir vetores complexos - Aqui redefinimos, junção da parte real e imaginária, o vetor Ψ e definimos o módulo da função de onda ao quadrado $|\Psi|^2$.

Cálculo de $H * \Psi$ e $d\Psi/dx$ - Aqui são calculados o operador Hamiltoniano aplicado à função de onda e a derivada da função de onda em relação à posição.

Cálculo das integrais - Aqui calculamos as integrais necessárias para a análise do problema.

Cálculo dos valores esperados - Aqui calculamos os valores esperados da energia, da posição, do momento e da derivada do potencial com relação à posição.

Derivadas temporais de $\langle x \rangle$ e $\langle p \rangle$ - Aqui calculamos as derivadas temporais do valor esperado da posição e do momento a fim de verificar o Teorema de Ehrenfest.

Geração das figuras - Nas próximas seções geramos as Figuras que se encontram nesse relatório e realizamos a animação da função de onda evoluindo temporalmente.

5 Conclusão

Com os cálculos e simulações realizados nesse projeto é com grande felicidade que é feita a afirmação de que foram fixados muito melhor os conhecimentos de Mecânica Quântica e a visualização e compreensão de vários conceitos. Além disso foi analisada a dinâmica no oscilador harmônico quântico com estados estacionários e não-estacionários, isso levou a compreensão e a análise do valor esperado de alguns observáveis e também a confirmação e verificação do Teorema de Ehrenfest.

Referências

- [1] David Jeffrey Griffiths. *Mecânica quântica*. Pearson Prentice Hall, 2011.
- [2] John W. Eaton, David Bateman, Søren Hauberg, and Rik Wehbring. *GNU Octave version 5.2.0 manual: a high-level interactive language for numerical computations*, 2020. URL <https://www.gnu.org/software/octave/doc/v5.2.0/>.