PRÀCTICA 6: **OSCIL·LADOR HARMÒNIC QUÀNTIC**

El comportament d'una partícula quàntica sota l'acció d'un potencial tipus oscil·lador harmònic ve donat per :

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

on k és la constant elàstica de l'oscil·lador. Aquest potencial representa molt bé el comportament de sistemes (molècules) de dues partícules lligades (com el nitrògen molecular).

Com que és un sistema estacionari, la part espacial de les fnucions d'ona será la solució de l'equació de Schrödinger independent del temps:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\Psi(x) = E\Psi(x)$$

Una manera d'estudiar numèricament aquesta equació consisteix en resoldre-la i utilizar els resultats de l'energia i les funcions d'ona en funció de 3 paràmetres: ***m, n*** i ***k***, de forma que la freqüència angular d'oscil·lació és $\omega^2 = k/m$. Les solucions per l'energia són:

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$$

I les funcions d'ons dels primers 4 estats són:

$$\Psi_0(x) = \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}}} e^{\frac{-a^2x^2}{2}}$$

$$\Psi_1(x) = \sqrt{\frac{a}{2\sqrt{\pi}}}\ 2ax\ e^{\frac{-a^2x^2}{2}}$$

$$\Psi_2(x) = \sqrt{\frac{a}{8\sqrt{\pi}}}(4a^2x^2 - 2)e^{\frac{-a^2x^2}{2}}$$

$$\Psi_3(x) = \sqrt{\frac{a}{48\sqrt{\pi}}}(8a^3x^3 - 12ax)e^{\frac{-a^2x^2}{2}}$$

on ***a*** és una constant a determinar per normalització. Podeu prendre ***a*** = 1, ***m*** = $m_{electró}$, ***k*** = $9.9 \cdot 10^{-21}$ *N/m,* que dóna $\omega = 3.1 \cdot 10^5$ rad.

Els exercicis a realitzar són:

a) Representar gràficament els nivells d'energia $\mathbf{E_n}$ i les funcions d'ona en funció de ***n***. Per això, el programa de simulació ha de preguntar a l'usuari el valor. **Preneu només els casos *n* = 0.5 i 2.5.**

b) Dibuixar la densitat de probabilitat $|\psi_n|^2$

c) Calculeu la probabilitat de trobar la partícula en un punt de coordenada ***x***.

d) Expliqueu breument els resultats assolits. Idea: compareu diverses tries de **k** i **m.**