

Métodos Computacionais em Física - 4300331 - 1s/ 2020

Prof. Dr. Luis Gregório Dias da Silva – FMT - IFUSP

Projeto 4 – Mecânica Quântica

Prazo de entrega: **23h55** de **5/07/2020 (Domingo)** através do site da disciplina.
NÃO SERÃO ACEITOS projetos enviados após esta data ou por e-mail!!

Orientação geral:

O projeto é *individual* e tem como objetivo o estudo computacional de o seguinte tema:

1- Dinâmica no oscilador harmônico quântico.

Arquivos:

O estudante deverá fazer o upload online dos arquivos de MatLab/Octave (“NomeDoAluno_Projeto4.m” ou, caso haja vários arquivos, enviar um arquivo zip “NomeDoAluno_Projeto4.zip”) prontos para serem executados (caso seja feita a opção por outra linguagem, fazer o upload do código-fonte e instruções de compilação) e um Relatório escrito (“NomeDoAluno_Projeto4_Relatorio.pdf”) contendo:

- Introdução

Introduza o problema a ser estudado. Escreva como se você estivesse explicando a um colega ou um outro professor. Lembre-se: o relatório do Projeto é um documento pensado para uma plateia mais ampla!

- Descrição da simulação numérica e dos resultados obtidos.

Descreva em detalhe o método numérico que você utilizou e sua escolha de parâmetros. Exemplo: O passo está adequado? Que testes você fez?

Use quantos gráficos você quiser para ilustrar suas conclusões. Não se limite aos tipos de gráficos usados nas tarefas. Quanto mais, melhor! Nos gráficos, serão avaliados aspectos como legenda, labels nos eixos, clareza na apresentação dos dados (símbolos, linhas, etc).

- “Manual do usuário” do seu script: Se um colega for rodar seu código, como ele deve proceder? Quais as variáveis importantes? Quais os parâmetros podem ser modificados?

- Conclusão

Que tipo de informação sobre o sistema **físico** a simulação numérica trouxe? Lembre-se: muita gente pode fazer programas mas poucos sabem interpretar o resultado!

- As legendas e labels tem que ser FACILMENTE legíveis. Use a opção ‘FontSize’ para aumentar o tamanho da fonte.

Descrição do tema proposto:

1- Dinâmica no oscilador harmônico quântico.

Em sala, fizemos a simulação numérica da propagação de um pacote de onda através de um potencial tipo “barreira quadrada”. Neste projeto, vamos estudar como se comporta a dinâmica de um estado quântico em um oscilador harmônico unidimensional.

O objetivo é, dada uma determinada condição inicial, encontrar a solução da Eq. de Schrödinger dependente do tempo

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

Equação 1

onde $V(x)$ é o potencial do **oscilador harmônico**: $V(x) = \frac{m}{2}\omega^2 x^2$.

A equação *independente* do tempo $\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right] \psi(x) = E\psi(x)$ tem soluções $\psi_n(x)$ com energias quantizadas E_n dadas por:

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

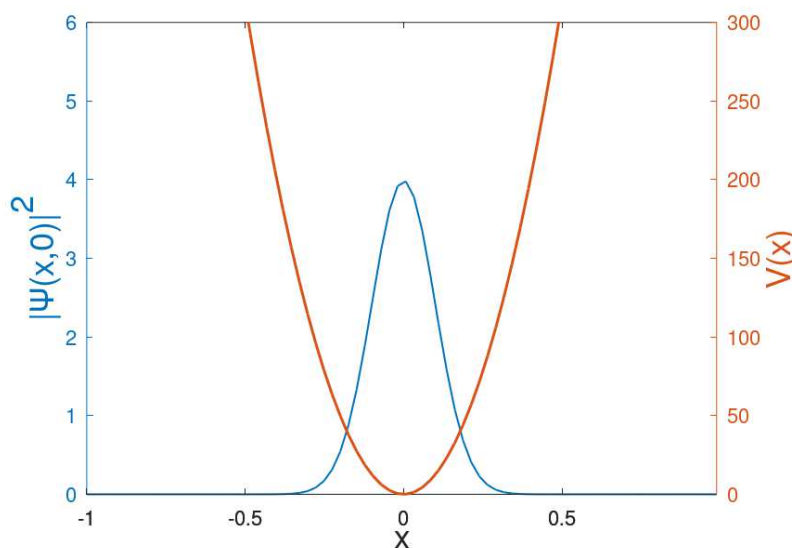
As soluções $\psi_n(x)$ podem ser escritas de forma analítica em termos de *polinômios de Hermite*. Estas expressões podem ser facilmente encontradas em livros-texto (e até na Wikipedia!). Por exemplo, para $n=0$, temos:

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

A figura ao lado ilustra o caso harmônico para um oscilador com **quantum de energia $\hbar\omega = 50$ e em unidades tais que $\hbar = m = 1$** com x variando entre -1 e 1 (unidades arbitrárias). Por simplicidade, vamos nos ater a esse caso e a essas unidades neste trabalho.

Exemplos de pontos para considerar no seu trabalho:

- Considere inicialmente a solução $\Psi(x, t)$ com condição inicial $\Psi(x, 0) = \psi_0(x)$, como na figura acima.
- Calcule o valor esperado da energia $\langle E \rangle$ em $t=0$ e compare com $\hbar\omega$. Que valor você obtém? Discuta.
- E o que ocorre no caso genérico em que $\Psi(x, 0) = \psi_n(x)$?



- Calcule a evolução nestes casos. Discuta o que ocorre e por quê.
- Nas simulações para calcular $|\Psi(x, t)|^2$, discuta quais os valores dos parâmetros numéricos (Δt , Δx , $r = \Delta t/(2\Delta x^2)$, etc.) que você deve usar para que os resultados (normalização, valor esperado da energia, etc.) façam sentido durante o tempo da simulação.
- Considere o caso $\Psi(x, 0) = \psi_0(x)e^{ik_0x}$ (escolha um valor de k_0). A exponencial complexa munda os resultados de $|\Psi(x, 0)|^2$ e $\langle E \rangle$? Discuta.
- Pesquise sobre o *Teorema de Ehrenfest* e mostre como ele se aplica ao caso da simulação temporal do oscilador harmônico.
- Para isso, faça gráficos de $\langle x \rangle(t)$ (valor esperado da posição) em função do tempo com condições iniciais como as listadas acima. Faça a simulação para tempos maiores que um período de oscilação $T = \frac{2\pi}{\omega}$. Discuta o resultado.
- **Etc. etc.**

Pontos a serem avaliados:

Projeto:

- Este projeto será avaliado como um **projeto de pesquisa** no tema do oscilador harmônico quântico. Os pontos acima são uma sugestão de roteiro daquilo minimamente esperado do projeto mas o trabalho não necessariamente se limita a eles. Perguntas e explorações propostas são encorajadas.

Participação nas “lives” é importante!!

- Na versão online do curso, haverá espaço durante as “lives” para dúvidas e discussões sobre o andamento dos projetos. Embora não seja obrigatória, a participação nas discussões é **muito importante** para a troca de ideias e sugestões sobre o andamento do seu projeto.

Relatório:

- Capricho na elaboração do texto relatório e qualidade dos gráficos.
- Descrição da simulação e discussão da física envolvida no problema.

Scripts:

- Originalidade e clareza na escrita do script.
- Facilidade de usar o script (“user-friendly”) e se a documentação (“Manual do usuário”) está adequada.
- Discussões com colegas são permitidas mas **CÓPIAS DE TRECHOS DE SCRIPTS SERÃO CONSIDERADAS PLÁGIO** e implicam em **nota zero** no projeto.

Pontualidade na entrega:

- **Responsabilidade com prazos e organização estão sendo avaliados.**
- Não deixe para entregar no final do prazo, especialmente nos minutos finais!
- Podem (e provavelmente vão!) ocorrer problemas como falha na conexão, falha no computador, falha no envio, etc. etc. Não vale a pena arriscar!!
- **Projetos e scripts enviados por e-mail não serão considerados!**