Entregar no FENIX antes das 23h59 de Quarta-feira, 21 de Junho. As duas primeiras páginas deverão ser este enunciado com as respostas, que são seguidas pelas páginas com a justificação das respostas claramente escritas. Deverá ser entregue como um único ficheiro em formato pdf com o número de aluno indicado no nome do ficheiro. Só o último ficheiro submetido será avaliado. Rascunhos não serão avaliados.

3.1 O oscilador harmónico tem um potencial quadrático

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

onde k é a constante de mola. Foi discutido em detalhe nas práticas. Classicamente temos uma força $F = -kx$ e a solução da equação de Newton para uma massa m é um movimento oscilatório com frequência angular $\omega = \sqrt{k/m}$.

Em mecânica quântica a solução da equação de Schrödinger a 1 dimensão tem a equação de Schrödinger estacionária associada,

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

que ou é demasiado complicada para esta cadeira para ser resolvida (ver o Griffiths) ou então os livros mais acessíveis dão uma lista de resultados para decorar (ver o Serway). Um resultado fundamental é que as energias estacionárias são

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, 3, 4, \ldots$$

ou seja cada "quanta" de diferença de energia $\hbar\omega = h\nu$ está de acordo com a lei de Planck.

Em unidades naturais a equação de Schrödinger estacionária pode-se escrever,

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{1}{2}x^2\psi(x) = E\psi(x).$$

tal como foi visto nas práticas. Se tentar resolver este problema com a massa do protão e a constante de mola da prática 3.3, rapidamente vai ter problemas se não usar unidades naturais!

Neste projecto vamos tentar encontrar numericamente as energias permitidas, E_n e as funções de onda estacionárias associadas, $\psi_n(x)$ com um método simples e geral.

Note que programas como o *Mathematica* sabem resolver simbolicamente a equação diferencial para o oscilador harmónico, mas para potenciais mais complicados só consegue resolver com métodos numéricos.

Vamos usar a aproximação para a segunda derivada vista nas práticas.

$$\frac{d^2}{dx^2}f(x) \simeq \frac{f(x+\Delta x) + f(x-\Delta x) - 2f(x)}{\Delta x^2}.$$

A equação vai ter de ser resolvida num intervalo $[-L/2, L/2]$ e vamos escolher um passo de discretização Δx. Para mostrar como fazer vamos usar um exemplo com precisão muito limitada.

Vamos escolher $L = 3$ e $\Delta x = 0.5$ para começar. A discretização da equação de Schrödinger estacionária fica,

$$
\begin{aligned}
&-\frac{1}{2}\frac{1}{0.5^2}(\psi(-1.5)+\psi(-0.5)-2\psi(-1.0))+\frac{1}{2}(-1.0)^2\psi(-1.0)=E\psi(-1.0)\\
&-\frac{1}{2}\frac{1}{0.5^2}(\psi(-1.0)+\psi(0.0)-2\psi(-0.5))+\frac{1}{2}(-0.5)^2\psi(-0.5)=E\psi(-0.5)\\
&-\frac{1}{2}\frac{1}{0.5^2}(\psi(-0.5)+\psi(0.5)-2\psi(-0.0))+\frac{1}{2}0.0^2\psi(0.0)=E\psi(0.0)\\
&-\frac{1}{2}\frac{1}{0.5^2}(\psi(0.0)+\psi(1.0)-2\psi(0.5))+\frac{1}{2}0.5^2\psi(0.5)=E\psi(0.5)\\
&-\frac{1}{2}\frac{1}{0.5^2}(\psi(0.5)+\psi(1.5)-2\psi(1.0))+\frac{1}{2}1.0^2\psi(1.0)=E\psi(1.0)
\end{aligned}
$$

que parece muito complicado até se escrever de forma matricial

$$
-\frac{1}{2}\frac{1}{0.5^2}\begin{pmatrix}-2&1&0&0&0\\1&-2&1&0&0\\0&1&-2&1&0\\0&0&1&-2&1\\0&0&0&1&-2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi(-1.0)\\\psi(-0.5)\\\psi(0.0)\\\psi(0.5)\\\psi(1.0)\end{pmatrix}
$$
$$
+\frac{1}{2}(0.5)^2\begin{pmatrix}4&0&0&0&0\\0&1&0&0&0\\0&0&0&0&0\\0&0&0&1&0\\0&0&0&0&4\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi(-1.0)\\\psi(-0.5)\\\psi(0.0)\\\psi(0.5)\\\psi(1.0)\end{pmatrix}=E\begin{pmatrix}\psi(-1.0)\\\psi(-0.5)\\\psi(0.0)\\\psi(0.5)\\\psi(1.0)\end{pmatrix},
$$

onde é mais fácil identificar o padrão da matriz que é preciso diagonalizar para encontrar os valores e vectores próprios,

$$
H=-2\begin{pmatrix}-2&1&0&0&0\\1&-2&1&0&0\\0&1&-2&1&0\\0&0&1&-2&1\\0&0&0&1&-2\end{pmatrix}+\frac{1}{8}\begin{pmatrix}4&0&0&0&0\\0&1&0&0&0\\0&0&0&0&0\\0&0&0&1&0\\0&0&0&0&4\end{pmatrix}.
$$

a) Encontre os valores próprios desta matriz (energias). Faça o gráfico dos vectores próprios que encontrou (funções de onda $\psi(x_n)$). (4 pontos)

b) Aumente o domínio do problema para $L = 5$. Quais foram as 3 menores energias que encontrou? (4 pontos)

c) Para $L = 5$ reduza o passo para $\Delta x = 0.2$. Quais foram as 3 menores energias que encontrou? Faça o gráfico das respectivas funções de onda. (10 pontos)

d) Reduza Δx e aumente L até ter as três energias mais baixas com uma precisão de 0.001. (2 pontos)

Se o problema numérico ficar lento pode encontrar algumas dicas Googlando "matlab tridiagonal matrix" ou equivalente.

a) Arranjou-se uma forma de colocar a discretização da equação de Schrödinger apresentada no enunciado em código de MatLab.

De seguida, usando funções já pré-programadas, averiguou-se que a matriz H era invertível (tem o mesmo número de pivôs que as suas linhas) para garantir a sua diagonalização. Com a função eig() obtiveram-se os valores e vetores próprios de H e fez-se o plot destes últimos segundo o domínio $[-L/2, L/2]$, com um passe de 0.5, sendo as fronteiras $-L/2$ e $L/2$ aproximadas a 0. Encontramos assim os "quanta" de energia que a equação de Schrödinger descreve.

```
K = (-2) * (diag(-2*ones(1,5)) + diag(1*ones(1,4),1) + diag(1*ones(1,4),-1));

V = (1/8) * diag([4 1 0 1 4]);

H = K + V;

rank = rank(H);

[eigenvectors, eigenvalues] = eig(H);

L = 3; dx = 0.5;

x = -(L/2)+dx:0.5:(L/2)-dx;

figure; hold on;
grid minor;
for i = 1:length(x)
    plot(x, eigenvectors(:, i));
end
```

rank = 5

↳ $x = [-1, -0.5, 0, 0.5, 1]$

	1	2	3	4	5
1	0.6741	0	0	0	0
2	0	2.3037	0	0	0
3	0	0	4.3324	0	0
4	0	0	0	6.3213	0
5	0	0	0	0	7.6185

eigenvalues (matriz diagonal com os valores próprios)

	1	2	3	4	5
1	-0.2616	-0.4761	-0.5743	-0.5228	0.3189
2	-0.5004	-0.5228	-0.0481	0.4761	-0.4972
3	-0.6019	3.2576e-17	0.5793	0	0.5497
4	-0.5004	0.5228	-0.0481	-0.4761	-0.4972
5	-0.2616	0.4761	-0.5743	0.5228	0.3189

1 2 3 4 5

eigenvectors

	1	2	3	4	5
1	4	-2	0	0	0
2	-2	4	-2	0	0
3	0	-2	4	-2	0
4	0	0	-2	4	-2
5	0	0	0	-2	4

K

+

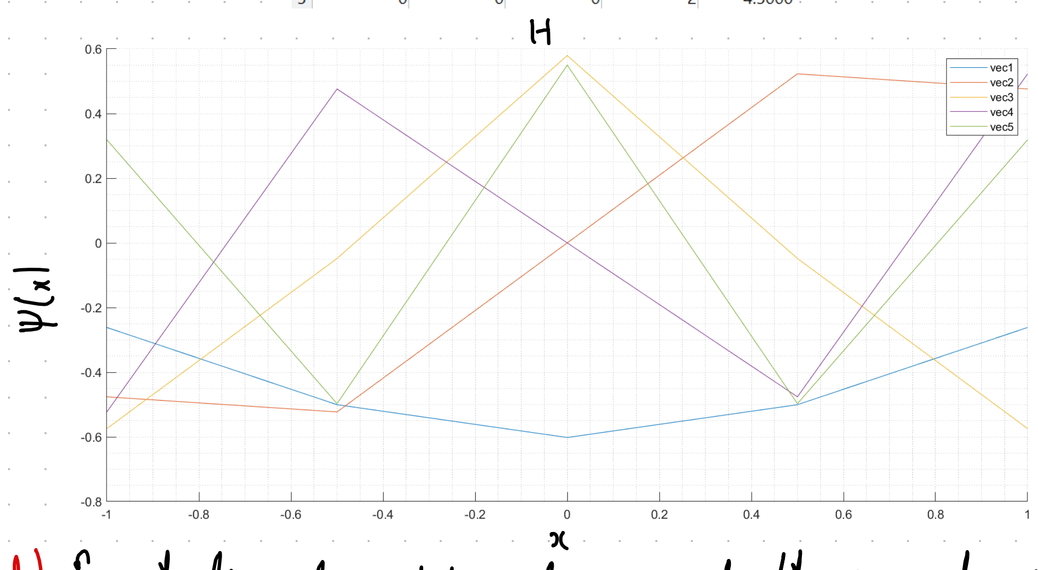
	1	2	3	4	5
1	0.5000	0	0	0	0
2	0	0.1250	0	0	0
3	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0.1250	0
5	0	0	0	0	0.5000

V

=

	1	2	3	4	5
1	4.5000	-2	0	0	0
2	-2	4.1250	-2	0	0
3	0	-2	4	-2	0
4	0	0	-2	4.1250	-2
5	0	0	0	-2	4.5000

H



b) Para esta alínea, fez-se tudo igual à exceção da determinação da matriz H, onde se usou um código que a gerou de forma automática consoante o domínio da função estudada e o passo escolhido para os valores do mesmo. No final aproveitou-se o facto dos valores próprios apresentados pela função eig() serem, neste caso em específico, ordenados de forma crescente e extraíram-se os três primeiros números mais pequenos.

Como não era pedido um gráfico dos vetores próprios, optou-se por não colocar.

```
L2 = 5; dx2 = 0.5;
n2 = L2/dx2-1;

x2 = -(L2/2)+dx2:dx2:(L2/2)-dx2;

K2 = ((-0.5) .* (1./(dx2.^2))) .* (diag(-2*ones(1,n2)) + diag(1*ones(1,n2-1),1) + diag(1*ones(1,n2-1),-1));

V2 = ((1/2) * x2.^2) .* diag(1*ones(1,n2));

H2 = K2 + V2;

[eigenvectors2, eigenvalues2_] = eig(H2);

for i = 1:length(eigenvalues2_(:,1))
    eigenvalues2(i, 1) = eigenvalues2_(i, i);
end

min_eig2 = [999, 999, 999];

ii=1;

for i = 1:length(eigenvalues2)
    if ii < 3+1
        if eigenvalues2(i) < min_eig2(ii)
            min_eig2(ii) = eigenvalues2(i);
            ii = ii + 1;
        end
    end
end
```

→ $x = [-2, -1.5, -1, -0.5, 0, 0.5, 1, 1.5, 2]$

$$K2 = \begin{bmatrix} 4 & -2 & & & \\ -2 & 4 & -2 & & \\ & & \ddots & & \\ & & -2 & 4 & -2 \\ & & & -2 & 4 \end{bmatrix} \qquad H2 = \begin{bmatrix} 6 & -2 & & & \\ -2 & 5.1250 & -2 & & \\ & -2 & 4.5 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & -2 & 6 \end{bmatrix}$$

$$V_2 = \begin{bmatrix} 2 & & & & & \\ & 1.1250 & & & & \\ & & 0.5 & & & \\ & & & 0.1250 & & \\ & & & & 0 \ddots & \\ & & & & & 2 \end{bmatrix}$$

O resultado pretendido está representado pelo vetor min_eig2, que contém os três valores próprios mais pequenos (energias).

	1	2	3
1	0.4974	1.5064	2.5780

min_eig2

vetores próprios associados ao espaço de cada valor próprio

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	0.0592	-0.1546	-0.2678	0.3637	-0.4192	0.4282	-0.3719	-0.4006	0.3328
2	0.1628	-0.3473	-0.4581	0.4091	-0.2116	-0.0440	0.2297	0.4583	-0.4075
3	0.3176	-0.4738	-0.3157	-0.0825	0.4050	-0.4044	0.1296	-0.3242	0.3445
4	0.4727	-0.3619	0.1548	-0.4400	0.1123	0.3888	-0.4069	0.1558	-0.2728
5	0.5398	-3.1398e-16	0.4354	-4.0410e-16	-0.4536	9.1847e-17	0.5031	-1.6102e-15	0.2452
6	0.4727	0.3619	0.1548	0.4400	0.1123	-0.3888	-0.4069	-0.1558	-0.2728
7	0.3176	0.4738	-0.3157	0.0825	0.4050	0.4044	0.1296	0.3242	0.3445
8	0.1628	0.3473	-0.4581	-0.4091	-0.2116	0.0440	0.2297	-0.4583	-0.4075
9	0.0592	0.1546	-0.2678	-0.3637	-0.4192	-0.4282	-0.3719	0.4006	0.3328

c) O raciocínio aqui usado foi igual ao da alínea b), com a adição do gráfico dos vetores próprios associados ao espaço dos valores próprios mais pequenos.

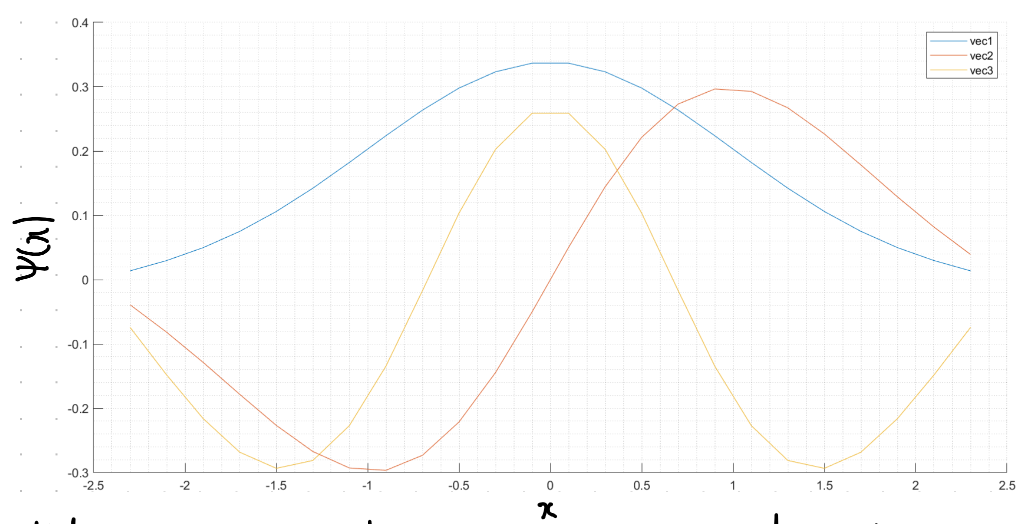
```
L3 = 5; dx3 = 0.2;
n3 = L3/dx3-1;

x3 = -(L3/2)+dx3:dx3:(L3/2)-dx3;

K3 = ((-0.5) .* (1./(dx3.^2))) .* (diag(-2*ones(1,n3)) + diag(1*ones(1,n3-1),1) + diag(1*ones(1,n3-1),-1));

V3 = ((1/2) * x3.^2) .* diag(1*ones(1,n3));

H3 =  K3 + V3;

[eigenvectors3, eigenvalues3_] = eig(H3);

for i = 1:length(eigenvalues3_(:,1))
    eigenvalues3(i, 1) = eigenvalues3_(i, i);
end

min_eig3 = [999, 999, 999];

ii=1;

for i = 1:length(eigenvalues3)
    if ii < 3+1
        if eigenvalues3(i) < min_eig3(ii)
            min_eig3(ii) = eigenvalues3(i);
            x_min_eig3(ii) = i;
            ii = ii + 1;
        end
    end
end

figure; hold on;
grid minor;
for i = 1:length(min_eig3)
    plot(x3, eigenvectors3(:, x_min_eig3(i)));
end
```

→ $x = [-2.3, -2.1, -1.9, -1.7, \dots, -0.1, 0.1, \dots, 1.7, 1.9, 2.1, 2.3]$

O resultado pretendido está representado pelo vetor min_eig3 (energias mais pequenas).

	1	2	3
1	0.5038	1.5444	2.7117

min_eig3



Optou-se por não apresentar os vetores próprios por terem dimensão 24.

d) Por um processo de tentativa-erro, foram-se mudando os valores de L e Δx com vista a manipular a precisão dos resultados da simulação através do domínio da função de onda estudado.

Para se obter uma precisão de 0.001, é necessário que o módulo da diferença entre os valores "quanta" de energia 0.5, 1 e 1.5 e os valores próprios mais baixos de H seja inferior a 0.001, o que se verifica para $L = 10$ e $\Delta x = 0.01$, por exemplo.

Não foi apresentado gráfico.

```
L4 = 10; dx4 = 0.01;
n4 = L4/dx4-1;

x4 = -(L4/2)+dx4:dx4:(L4/2)-dx4;

K4 = ((-0.5) .* (1./(dx4.^2))) .* (diag(-2*ones(1,n4)) + diag(1*ones(1,n4-1),1) + diag(1*ones(1,n4-1),-1));

V4 = ((1/2) * x4.^2) .* diag(1*ones(1,n4));

H4 =  K4 + V4;

[eigenvectors4, eigenvalues4_] = eig(H4);

for i = 1:length(eigenvalues4_(:,1))
    eigenvalues4(i, 1) = eigenvalues4_(i, i);
end

min_eig4 = [999, 999, 999];

ii=1;

for i = 1:length(eigenvalues4)
    if ii < 3+1
        if eigenvalues4(i) < min_eig4(ii)
            min_eig4(ii) = eigenvalues4(i);
            ii = ii + 1;
        end
    end
end
```

	1	2	3
1	0.499996875057261	1.499984378499264	2.499959458381706

min_eig4

Onde se observa uma seta (↑) encontra-se a casa decimal de precisão.