

## Artigos Gerais

# O método de Galerkin para a quantização de sistemas Hamiltonianos (*Galerkin's method for the quantization of Hamiltonian systems*)

G.A. Monerat<sup>1</sup>, E.V. Corrêa Silva<sup>1</sup>, L.B. Leal<sup>1</sup>, G. Oliveira-Neto<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Matemática, Física e Computação, Faculdade de Tecnologia,  
Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Resende, RJ, Brasil*

<sup>2</sup>*Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, MG, Brasil*

Recebido em 1/4/2015; Aceito em 5/7/2015; Publicado em 12/12/2015

Apresentamos o método espectral de Galerkin como uma ferramenta para a quantização de sistemas hamiltonianos. Este método pode ser introduzido como um tópico em uma disciplina de introdução à mecânica quântica em um curso de graduação em física. Comparado ao método de diferenças finitas, o método espectral possibilita precisão muito maior, além de fornecer expressões analíticas aproximadas para as autofunções de energia, e é suficientemente simples para ser exposto em cerca de quatro horas-aula. No presente trabalho, apresentamos o método em detalhe, aplicando-o à equação de Schrödinger para o oscilador harmônico simples e para o oscilador harmônico quártico. A precisão dos resultados é comparada aos fornecidos pelo método de diferenças finitas.

**Palavras-chave:** sistemas hamiltonianos, equação de Schrödinger, método espectral de Galerkin.

We present the Galerkin spectral method as a tool for the quantization of hamiltonian systems. This method can be introduced as a topic in an undergraduate introductory Physics course on Quantum Mechanics. Compared to the finite differences method, the spectral method allows greater precision, in addition to providing analytical expressions for the energy eigenfunctions, as well as being sufficiently simple to be exposed in about four hours. In the present work, we present the method in detail, applying it to the Schrödinger equation for the simple harmonic oscillator and for the quartic oscillator. The precision of results is compared to those yielded by the method of finite differences.

**Keywords:** Hamiltonian systems, Schrödinger equation, Galerkin's spectral method.

## 1. Introdução

A mecânica quântica é a teoria que descreve os sistemas físicos em escala atômica e sub-atômica. Sua importância advém dos muitos fenômenos físicos cujas explicações somente são possíveis quando efeitos quânticos são levados em consideração; por exemplo, a questão da estabilidade do átomo. De acordo com a mecânica clássica [1] e a teoria eletromagnética de Maxwell [2], o átomo de hidrogênio seria instável, pois uma partícula carregada como o elétron, ao percorrer sua órbita em torno do núcleo, iria perder energia na forma de radiação eletromagnética, devido a aceleração, vindo finalmente a colapsar no núcleo atômico no curtíssimo intervalo de tempo de aproximadamente  $1,6 \times 10^{-11}$  s [3]. A teoria quântica também descreve com precisão diversos fenômenos macroscópicos oriundos do comportamento coletivo de entidades microscópicas como a radiação de corpo negro (descrita por Planck em 1901) a supercondutividade (obser-

vada pela primeira vez em 1911 na Holanda por Heike Kamerlingh-Onne) e a superfluidez (descoberta em 1937 por Pyotr Kapitsa, John F. Allen e Don Misener ao estudarem o hélio líquido). Transistores e circuitos integrados são exemplos de aplicações tecnológicas de efeitos quânticos, e há ainda possíveis futuras aplicações como a computação quântica [4] e o monitor de televisão com tela de *pontos quânticos* [5]. Devido a tudo que foi exposto acima, o ensino de mecânica quântica para estudantes de física e engenharia torna-se muito importante. Para as áreas de engenharia, Maria Greca e cols. [6] apresentam uma proposta para o ensino de mecânica quântica.

No estudo sobre a mecânica quântica e seus efeitos, a determinação da função de onda de um determinado sistema é o ponto central na descrição do seu comportamento. Por outro lado, esta não é uma tarefa muito fácil. Soluções analíticas para a equação de Schrödinger são difíceis de serem obtidas, e poucos são os casos em que isto é possível. Por conta desta difi-

<sup>1</sup>E-mail: [germano.monerat@pq.cnpq.br](mailto:germano.monerat@pq.cnpq.br).

culdade, inúmeros métodos [7–12] têm sido propostos na tentativa de descrição de diversos sistemas físicos. Apesar disto, a maioria dos cursos de graduação em Física limita-se a discutir apenas os métodos WKB [13] e a teoria de perturbação independente e dependente do tempo [14]. Neste artigo, propomos a introdução do método espectral de Galerkin, a ser ministrado durante a disciplina introdutória à mecânica quântica, em aproximadamente 4 horas-aula. O método de Galerkin tem sido utilizado para descrição de estados ligados [15–18] com precisão muito superior ao do método de diferenças finitas, fornecendo ao discente uma expressão analítica aproximada para os autoestados de energia e consequentemente para a função de onda.

O método de Galerkin também tem sido utilizado para a quantização de modelos cosmológicos homogêneos e isotrópicos de Friedmann-Robertson-Walker [16, 17, 19]. Porém, nestes casos a equação que governa a dinâmica quântica do sistema não é a equação de Schrödinger, mas a equação de Wheeler-DeWitt, da qual a equação de Schrödinger é um caso particular.

Na seção 2, apresentamos algumas considerações sobre as equações de Schrödinger e Wheeler-DeWitt. Na seção 3 o método espectral de Galerkin é apresentado em detalhes, e na seção 4 o aplicamos ao caso de um oscilador harmônico na semi-reta, calculando seus 5 níveis mais baixos de energia. Pacotes de onda são construídos e o valor médio da posição e as incertezas associadas são calculadas. Em seguida comparamos o resultado numérico para o espectro de energia com o resultado analítico, conhecido na literatura. Também comparamos o resultado obtido para o espectro de energia com aquele obtido usando o método de diferenças finitas. Na seção 5 aplicamos o método, respectivamente, a um oscilador anarmônico quartico na semi-reta. Na seção 6, apresentamos nossos comentários finais e conclusões.

## 2. As equações de Schrödinger e de Wheeler-Dewitt

No estudo sobre os fenômenos quânticos (que ocorrem em escala atômica e sub-atômicas), a determinação da função de onda  $\Psi(q, t)$  de um sistema físico, em função das coordenadas generalizadas  $q = (q_1, q_2, \dots, q_N)$  e do tempo  $t$ , é de vital importância, pois nelas estão contidas todas as informações relevantes para as propriedades físicas do sistema [14]. Em outras palavras, o conhecimento, para um determinado sistema físico, de sua função de onda  $\Psi(q, t)$  possibilitará a descrição dos possíveis estados desse sistema. Em geral,  $\Psi(q, t)$  é uma função complexa, sendo seu significado físico fornecido pela sua norma,  $|\Psi(q, t)|^2$ . Esta última é uma função real e pode ser interpretada como a probabilidade, por unidade de tempo, de uma partícula ser detectada em um elemento de volume  $d^N q$  em torno da configuração  $q$  em um dado instante de

tempo  $t$ .

A descrição da evolução temporal do estado quântico é fornecida pela conhecida equação de Schrödinger

$$\hat{H}\Psi(q, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(q, t)}{\partial t}, \quad (1)$$

proposta em 1925 por Erwin Schrödinger, na qual  $\hat{H}$  é o operador auto-adjunto denominado *Hamiltoniano*. No restante deste trabalho, utilizaremos o sistema de unidades natural, em que  $\hbar = 1$ . No processo de quantização de sistemas hamiltonianos, elevamos ao grau de operadores as coordenadas  $q_i$  e os momenta canonicamente conjugados  $p_i$

$$q_i \rightarrow \hat{q}_i, \quad p_i \rightarrow \hat{p}_i, \quad (2)$$

definidos pela sua atuação sobre um estado do espaço de Hilbert  $|\alpha\rangle$ ,

$$\hat{q}_i|\alpha\rangle = q_i|\alpha\rangle, \quad \hat{p}_i|\alpha\rangle = -i \frac{\partial}{\partial q_i}|\alpha\rangle. \quad (3)$$

Exemplifiquemos considerando o caso unidimensional  $q = (x)$  de uma partícula de massa  $m$  submetida a um potencial  $V(x)$ . A função de Hamilton  $\mathcal{H}$  assume a forma

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}p^2 + V(x). \quad (4)$$

Logo, aplicando as relações (2) e (3) na Eq. (4), encontramos a equação de Schrödinger unidimensional

$$\left(-\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right) \Psi(x, t) = i \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}. \quad (5)$$

Uma outra equação quântica na qual podemos aplicar o método espectral para obtermos soluções aproximadas é a *equação de Wheeler-DeWitt*, obtida ao quantizarmos canonicamente a relatividade geral. Esta teoria pode ser colocada na forma hamiltoniana via formalismo ADM [20]; obtém-se uma teoria com vínculos [21], e a sua quantização pode ser feita através do método de Dirac [22]. Um dos vínculos da relatividade geral envolve a própria função de Hamilton

$$\mathcal{H}(q, p) = 0. \quad (6)$$

A quantização de sistemas que respeitem o vínculo descrito leva à equação

$$\hat{H}\Psi(q, t) = 0. \quad (7)$$

No caso da cosmologia quântica, esta equação dá origem a equação de *Wheeler-DeWitt* [23]. Trata-se de uma equação diferencial funcional, definida em um espaço no qual todas as geometrias espaciais possíveis existem: o *superespaço*. Mas para esse superespaço nenhuma solução exata é conhecida até o momento. Uma forma de obtermos soluções para esta equação

consiste em restringirmos o número de graus de liberdade, limitando as soluções ao que chamamos de *mini-superespaço*.

Como exemplo, vamos considerar neste mini-superespaço os modelos homogêneos e isotrópicos de *Friedmann-Robertson-Walker* [24] cujo conteúdo material consista em poeira e uma constante cosmológica. Fazendo uso do formalismo variacional de Schultz para fluidos [25], e do formalismo de Dirac, a equação de Wheeler-DeWitt associada a estes modelos assume a forma

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial a^2} + 144ka^2 - 24\Lambda a^4\right) \Psi(a, t) = i 24 a \frac{\partial \Psi(a, t)}{\partial t}, \quad (8)$$

em que  $a$  é o fator de escala do universo,  $k$  a curvatura da seção espacial e  $\Lambda$  é a constante cosmológica. Não é nossa intenção discutirmos os detalhes desses modelos em cosmologia quântica neste trabalho; nosso intuito é chamar a atenção para a diferença entre a equação de Schrödinger (5) e a equação de Wheeler-DeWitt (8). Àqueles interessados em conhecer mais sobre esses modelos sugerimos a Ref. [26]. De um modo geral, a equação de Wheeler-DeWitt apresenta uma função  $g(a)$  do fator de escala multiplicando o termo de derivada temporal (em nosso exemplo, Eq. (8), temos  $g(a) = a$ ). Assim, quando  $g(a) = 1$ , a equação de Wheeler-DeWitt se reduz à equação de Schrödinger. Conforme veremos na seção seguinte, o método espectral pode ser aplicado em ambas as equações.

Consideraremos equações diferenciais ordinárias da forma

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + f(x)\right) \psi(x) = E g(x)\psi(x). \quad (9)$$

definidas na semi-reta  $x \in [0, \infty)$ , sendo  $f(x)$  e  $g(x)$  funções conhecidas de variável espacial  $x$ ,  $\psi(x)$  a parte espacial da função de onda (complexa) do sistema quântico, e  $E$  o autovalor de energia. (A equação de Schrödinger é obtida quando  $g(x) = 1$ .)

Da Eq. (9) e de condições de contorno da forma

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow 0} \left(C_1 \psi(x) + C_2 \psi'(x)\right) &= \\ \lim_{x \rightarrow \infty} \left(C_1 \psi(x) + C_2 \psi'(x)\right) &= 0, \end{aligned}$$

em que  $(C_1, C_2)$  são constantes, pode-se mostrar que [27]

$$(E_i - E_j) \int_0^\infty dx \psi_i^*(x) g(x) \psi_j(x) = 0, \quad (10)$$

em que  $\{E_i, E_j\}$  são autovalores correspondentes às autofunções  $\{\psi_i(x), \psi_j(x)\}$ , respectivamente. Se  $E_i \neq E_j$ , obtemos

$$\int_0^\infty dx \psi_i^*(x) g(x) \psi_j(x) = 0. \quad (11)$$

O lado esquerdo desta equação é definido como sendo o *produto interno* entre as funções  $\psi_i$  e  $\psi_j$ , denotado como  $(\psi_i, \psi_j)$ . Para duas funções  $\Psi$  e  $\Phi$  quaisquer, temos

$$(\Psi, \Phi) \equiv \int_0^\infty dx \Psi^*(x) g(x) \Phi(x). \quad (12)$$

Duas funções são ditas *ortogonais* se o seu produto interno for nulo.

Observe a presença da *função-peso*  $g(x)$  na Eq. (9), definida a menos de uma constante multiplicativa. Com o produto interno definido deste modo, dois estados quânticos para os quais uma medida da grandeza  $E$  certamente forneça resultados distintos são ortogonais [28]. Esta definição também garante que o operador Hamiltoniano

$$\hat{\mathcal{H}} \equiv -\frac{d^2}{dx^2} + f(x) \quad (13)$$

seja auto-adjunto [29]

$$(\phi, \hat{\mathcal{H}}\psi) = (\hat{\mathcal{H}}\phi, \psi). \quad (14)$$

Tendo em vista que a função de onda  $\psi(x)$  deve tender a zero suficientemente rápido para  $x \rightarrow \infty$ , podemos restringir, para fins de cálculos numéricos, o domínio da equação ao intervalo  $x \in [0, L]$  o que equivale a colocarmos duas barreiras de potencial infinito em  $x = 0$  e  $x = L$ , o que nos leva às condições de contorno  $\psi(0) = \psi(L) = 0$ .

Seja  $\psi_p(x)$  a autofunção associada ao  $p$ -ésimo autovalor  $E_p$ . Escolhamos uma base ortonormal finita de  $N$  funções para expandirmos  $\psi_p(x)$ ; uma possível escolha é

$$\psi_p(x) \approx \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{n=1}^N A_n^{(p)} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad (15)$$

com os coeficientes  $A_n^{(p)}$  a determinar. (O método de Galerkin requer que as funções da base escolhida satisfaçam as condições de contorno em  $x = 0$  e  $x = L$  [30].) Expandimos de modo análogo os termos contendo  $f(x)$  e  $g(x)$  na Eq. (9),

$$f(x)\psi_p(x) \approx \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{n=1}^N F_n^{(p)} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad (16)$$

$$g(x)\psi_p(x) \approx \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{n=1}^N G_n^{(p)} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad (17)$$

o que nos leva a relações entre os coeficientes da forma

$$F_n^{(p)} = \sum_{m=1}^N \Phi_{n,m} A_m^{(p)}, \quad (18)$$

$$G_n^{(p)} = \sum_{m=1}^N \Gamma_{n,m} A_m^{(p)}, \quad (19)$$

tal que

$$\Phi_{n,m} = \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) f(x) \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) dx, \quad (20)$$

e

$$\Gamma_{n,m} = \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) g(x) \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) dx. \quad (21)$$

Com estas expansões, Eq. (9) fornece

$$\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 A_n^{(p)} + \sum_{m=1}^N \Phi_{n,m} A_m^{(p)} = E \sum_{m=1}^N \Gamma_{n,m} A_m^{(p)}, \quad (22)$$

ou, na forma matricial,

$$\Delta A^{(p)} = E_p \Gamma A^{(p)}, \quad (23)$$

em que os elementos da matrix  $\Gamma$  ( $N \times N$ ) são dados pela Eq. (21);  $A^{(p)}$  é uma matriz coluna ( $1 \times N$ ) com elementos  $A_m^{(p)}$ , e  $\Delta$  é a matriz ( $N \times N$ ) com elementos

$$\Delta_{n,m} = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \delta_{n,m} + \Phi_{n,m}. \quad (24)$$

A solução da Eq. (23) fornece os autovalores  $E_p$  e autovetores  $A^{(p)}$  e assim as autofunções aproximadas  $\psi_p(x)$  da Eq. (15).

A posição esperada em função do tempo de um pacote de onda  $\Psi(x,t)$ , combinação linear das autofunções, é

$$\langle x \rangle(t) = \int_0^\infty dx \Psi^*(x,t) g(x) x \Psi(x,t), \quad (25)$$

e a incerteza na posição, também como função do tempo, é dada por

$$\begin{aligned} \sigma(t) &= \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \\ &= \left[ \int_0^\infty dx \Psi^*(x,t) g(x) x^2 \Psi(x,t) \right. \\ &\quad \left. - \left( \int_0^\infty dx \Psi^*(x,t) g(x) x \Psi(x,t) \right)^2 \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (26)$$

Em termos práticos: para resolvermos a equação de autovalores (9), tomamos autofunções aproximadas da forma (15); esta forma nos leva à equação matricial de autovalores (23); a solução desta nos fornece os valores aproximados das auto-energias e dos coeficientes das autofunções.

À guisa de exemplo, considere uma partícula em um poço finito junto à origem de largura  $a$  e altura  $V_0$ , representado por um potencial da forma (vide Fig. 1)

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } 0 \leq x < a \\ V_0, & \text{se } x \geq a. \end{cases} \quad (27)$$

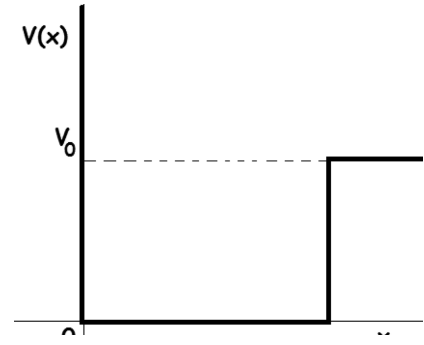


Figura 1 - Forma do potencial de um poço finito junto à origem, de largura  $a$  e altura  $V_0$ .

Vamos determinar os autovalores e autofunções aproximadas dos estados ligados deste sistema, ou seja, aqueles cujas autofunções sejam nulas em regiões afastadas do poço, situado junto à origem. A equação de Schroedinger independente do tempo é da forma

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right) \psi(x) = E\psi(x), \quad (28)$$

o que equivale a fazermos  $f(x) = V(x)$  e  $g(x) = 1$  na equação geral (9). Para construirmos a equação matricial de autovalores (23) para este caso, precisamos calcular os elementos de matriz  $\Phi_{n,m}$  e  $\Gamma_{n,m}$  dados pelas Eqs. (20) e (21), respectivamente. Escolhendo  $L = 2a$ , obtemos

$$\Phi_{n,m} = \frac{V_0}{a} \int_a^{2a} \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{2a}\right) dx, \quad (29)$$

$$\Gamma_{n,m} = \frac{1}{a} \int_0^{2a} \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{2a}\right) dx. \quad (30)$$

Por sua vez, estas integrais definidas podem ser obtidas a partir da primitiva

$$F_{n,m} = \int \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{2a}\right) dx, \quad (31)$$

que resulta em

$$F_{n,m} = \begin{cases} \frac{x}{2} - \frac{a}{2n\pi} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), & \text{se } n = m; \\ \frac{\pi(n^2 - m^2)}{\pi(n^2 - m^2)} \left[ m \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) \cos\left(\frac{m\pi x}{2a}\right) - n \cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{2a}\right) \right], & \text{se } n \neq m. \end{cases} \quad (32)$$

Como consequência,

$$\Phi_{n,m} = \frac{V_0}{a} F_{n,m} \Big|_a^{2a} = \begin{cases} \frac{V_0}{2}, & \text{se } n = m; \\ 0, & \text{se } n \neq m. \end{cases} \quad (33)$$

$$\Gamma_{n,m} = \frac{1}{a} F_{n,m} \Big|_0^{2a} = \begin{cases} 1, & \text{se } n = m; \\ 0, & \text{se } n \neq m. \end{cases} \quad (34)$$

Portanto,

$$\Delta_{n,m} = \begin{cases} \frac{n^2\pi^2}{4a^2} + \frac{V_0}{2}, & \text{se } n = m; \\ 0, & \text{se } n \neq m. \end{cases} \quad (35)$$

Utilizemos  $N = 3$  níveis para a autofunção aproximada (15)

$$\psi_p(x) \approx \frac{1}{\sqrt{a}} \left[ A_1^{(p)} \sin\left(\frac{\pi x}{2a}\right) + A_2^{(p)} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + A_3^{(p)} \sin\left(\frac{3\pi x}{2a}\right) \right]. \quad (36)$$

Obtemos da Eq. (23) a equação matricial

$$\begin{bmatrix} \frac{\pi^2}{4a^2} + \frac{V_0}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\pi^2}{a^2} + \frac{V_0}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{9\pi^2}{4a^2} + \frac{V_0}{2} \end{bmatrix} = E_p \begin{bmatrix} A_1^{(p)} \\ A_2^{(p)} \\ A_3^{(p)} \end{bmatrix} \quad (37)$$

ou

$$MA^{(p)} = 0, \quad (38)$$

em que

$$M = \begin{bmatrix} \frac{\pi^2}{4a^2} + \frac{V_0}{2} - E_p & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\pi^2}{a^2} + \frac{V_0}{2} - E_p & 0 \\ 0 & 0 & \frac{9\pi^2}{4a^2} + \frac{V_0}{2} - E_p \end{bmatrix}. \quad (39)$$

Para que este sistema admita soluções não-triviais  $A^{(p)} \neq 0$ , impomos a condição  $\det(M) = 0$ . Desta equação obtemos os valores admissíveis para  $E_p$ , fornecendo assim os níveis mais baixos do espectro aproximado de autovalores do problema. Os coeficientes  $A^{(p)}$  correspondentes são obtidos ao inserirmos cada um destes valores de  $E_p$  na Eq. (37). Obtemos os seguintes autovalores e autofunções aproximadas.

$$E_1 = \frac{\pi^2}{4a^2} + \frac{V_0}{2}, \quad \psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{2a}\right); \quad (40)$$

$$E_2 = \frac{\pi^2}{a^2} + \frac{V_0}{2}, \quad \psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right); \quad (41)$$

$$E_3 = \frac{9\pi^2}{4a^2} + \frac{V_0}{2}, \quad \psi_3(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{3\pi x}{2a}\right). \quad (42)$$

### 3. O oscilador harmônico na semi-reta

Primeiramente, vamos comparar a precisão do

método usando como teste o oscilador harmônico unidimensional [31] na semi-reta ( $x \geq 0$ ), que possui soluções analíticas bem conhecidas (as autofunções *ímpares* do oscilador harmônico para  $x \in \mathfrak{R}$  e seus respectivos autovalores).

$$-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \omega^2 x^2 \psi(x) = E\psi(x). \quad (43)$$

Faremos uso do pacote **Spectral** [32], que implementa o método espectral para obtenção de soluções das equações de Wheeler-DeWitt e Schrödinger, bem como oferece um conjunto de ferramentas para verificação das soluções, nas linguagens Maple e Octave. O pacote e o manual do usuário encontram-se disponíveis na Ref. [33].

A Tabela 1, com dados calculados pelo pacote **Spectral** para  $N = 100$  níveis e amplitude de intervalo  $L = 10$ , exibe os cinco níveis mais baixos de energia e os compara com os resultados obtidos usando o método de diferenças finitas [34].

Tabela 1 - Espectro de energia para os 5 primeiros níveis de energia do oscilador harmônico (com  $\hbar = 1$  e  $\omega = 1$ ). Aqui, os  $E_n$  representam os níveis de energia exatos,  $E_n^{(df)}$  os níveis calculados via método das diferenças finitas, e  $E_n^{(esp)}$  os níveis calculados via método espectral. Os erros absolutos dos níveis de energia calculados via método das diferenças finitas e via método espectral em relação aos níveis exatos são dados por  $\delta E_n^{(df)}$  e  $\delta E_n^{(esp)}$ , respectivamente. Observe que os erros absolutos associados ao método espectral são muito menores do que os do método de diferenças finitas.

Espectro de energia do oscilador harmônico na semi-reta					
$n$	$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$	$E_n^{(df)}$	$E_n^{(esp)}$	$\delta E_n^{(df)} =  E_n - E_n^{(df)} $	$\delta E_n^{(esp)} =  E_n - E_n^{(esp)} $
1	1.5	1.499972221666703	1.499999999999893	$2.7778333297 \times 10^{-4}$	$1.1 \times 10^{-13}$
2	3.5	3.499861105493002	3.499999999999906	$1.38894506998 \times 10^{-4}$	$9.0 \times 10^{-14}$
3	5.5	5.499661090058020	5.499999999999967	$3.38909941980 \times 10^{-4}$	$3.0 \times 10^{-14}$
4	7.5	7.499372169433199	7.499999999999972	$6.27830566801 \times 10^{-4}$	$3.0 \times 10^{-14}$
5	9.5	9.498994337688250	9.499999999999931	$1.00566231175 \times 10^{-3}$	$7.0 \times 10^{-14}$

A Tabela 1 mostra que os valores do espectro obtido através do método espectral são muito próximos dos valores teóricos. O maior desvio encontrado é da ordem de  $\delta E_{\max}^{(esp)} \sim 10^{-13}$  para os 5 primeiros níveis, ao passo que o desvio máximo para o método das diferenças finitas é da ordem de  $\delta E_{\max}^{(df)} \sim 10^{-3}$ .

Os autoestados associados aos autovalores mostrados na Tabela 1 são representados na Fig. 2.

Pacotes de onda podem ser construídos através da superposição de um número finito  $N$  de autoestados,

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^N C_n \psi_n(x) e^{-iE_n t}, \quad (44)$$

e a dinâmica destes estudada. A Fig. 3 exibe o comportamento de um pacote de onda construído pela superposição dos cinco primeiros níveis (ou seja,  $C_n = 1$  para  $1 \leq n \leq 5$  e  $C_n = 0$  para  $n > 5$ ) em cinco instantes de tempo diferentes.

A descrição do comportamento dos sistemas quânticos envolve os conceitos de *valor esperado* e de *incerteza* de uma grandeza física. O valor esperado de

uma grandeza  $F$ , para um sistema em um estado descrito por  $\Psi(x, t)$ , é

$$\langle F \rangle_t = \frac{\langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{\int_0^L \Psi(x, t)^* (\hat{F} \Psi(x, t)) g(x) dx}{\int_0^L |\Psi(x, t)|^2 g(x) dx}, \quad (45)$$

em que  $\hat{F}$  é o operador associado à grandeza  $F$ , e  $g(x)$  é a *função-peso*, introduzida no produto interno para garantir que o operador hamiltoniano seja auto-adjunto e suas autofunções sejam ortogonais [27]. A *incerteza* associada a este valor esperado é definida como

$$\sigma(t) = \sqrt{\langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2}. \quad (46)$$

(Para o oscilador harmônico, temos  $g(x) = 1$ .) Uma vez que os pacotes de onda estejam normalizados, o denominador da Eq. (45) é igual a unidade.

As Figs. 4 e 5 mostram o comportamento do valor esperado da posição  $\langle x \rangle$  e da incerteza  $\sigma$  em função do tempo, para o oscilador harmônico (43).

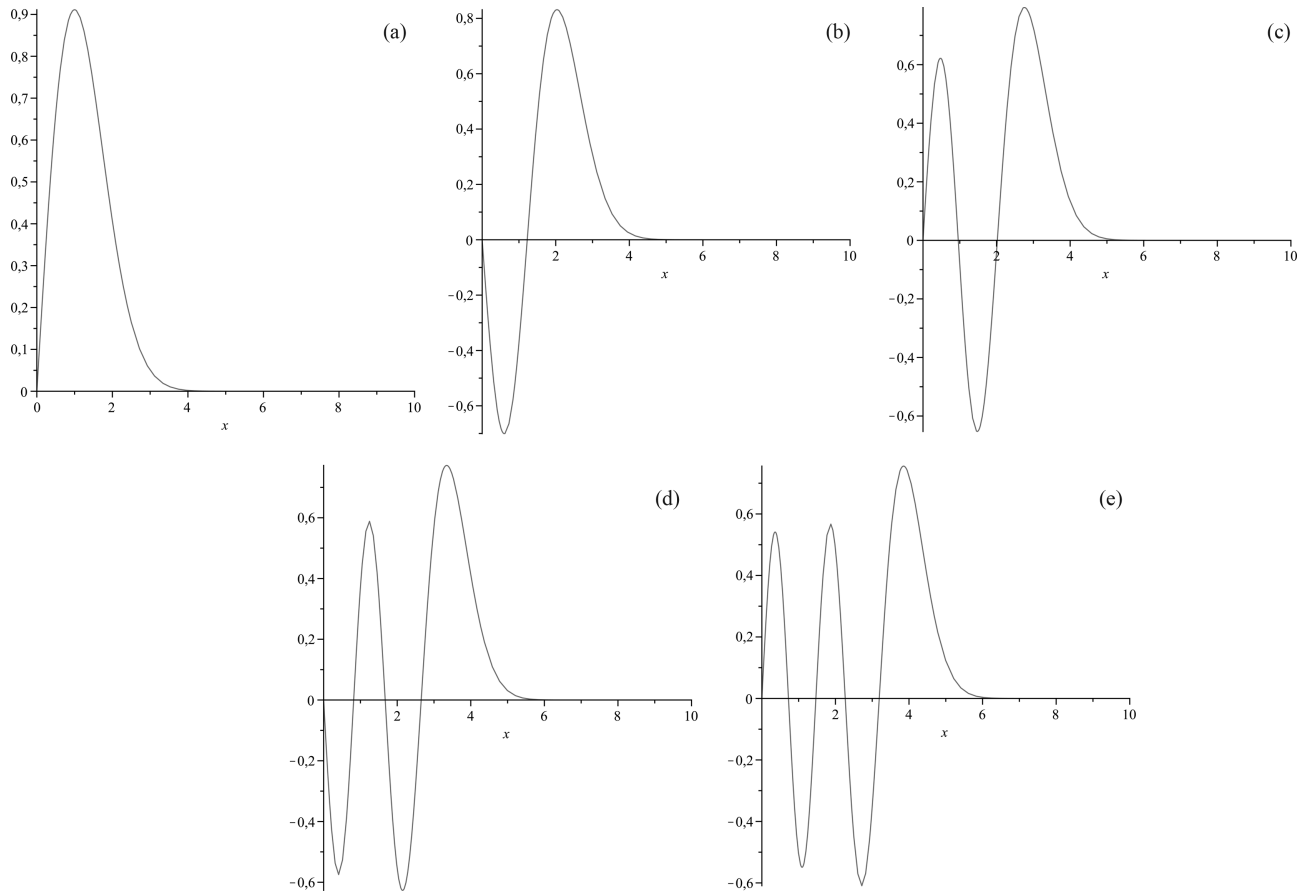


Figura 2 - Os cinco primeiros autoestados do oscilador harmônico na semi-reta, associados aos autovalores da energia mostrados na Tabela 1.

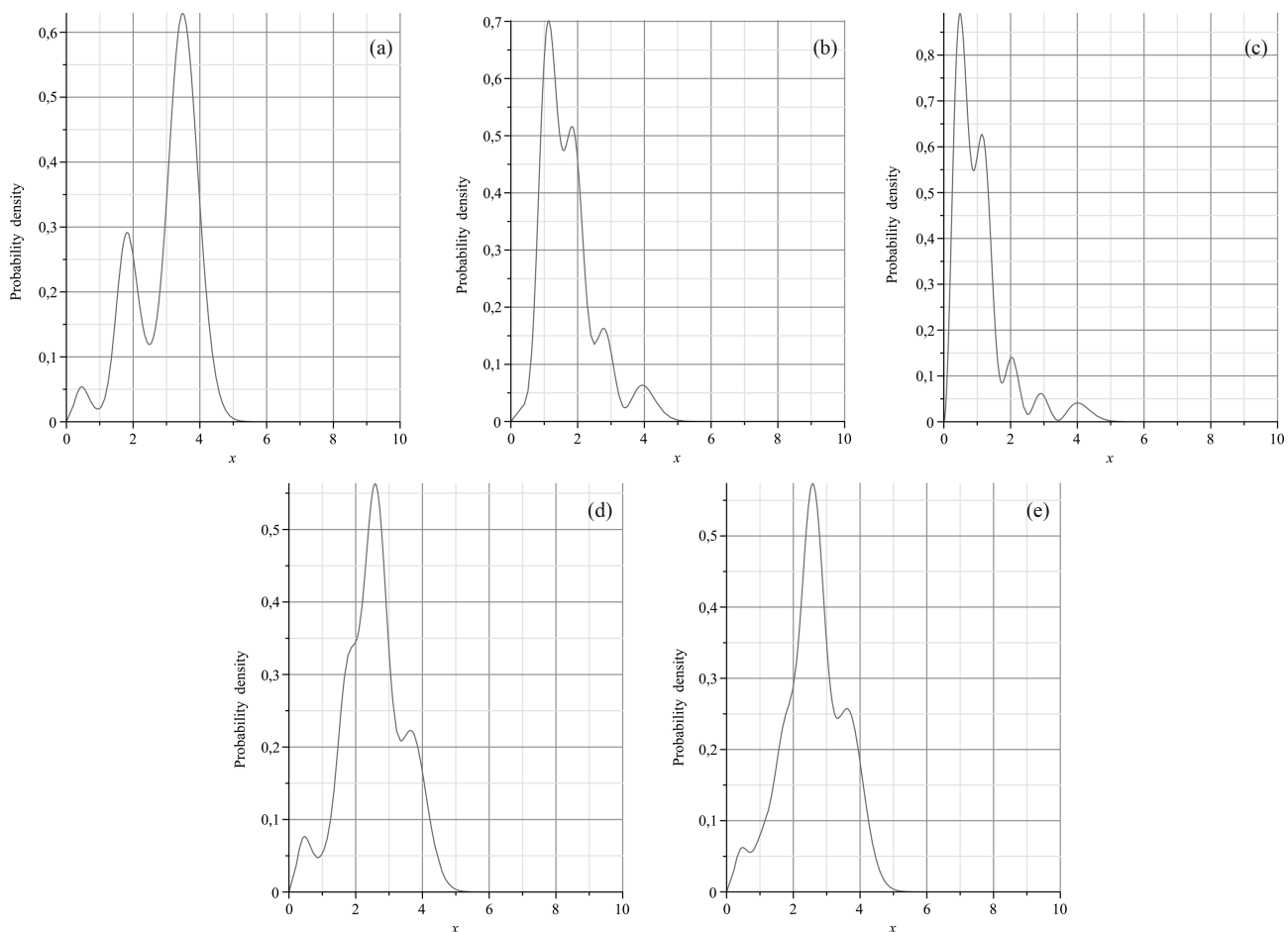


Figura 3 - Densidade de probabilidade para o pacote de onda construído pela superposição dos cinco primeiros autoestados representados na Fig. 2, em cinco instantes de tempo distintos:  $t = 0, 1, 5, 10,$  e  $100$ . Aqui,  $C_n = 1$  para  $1 \leq n \leq 5$  e  $C_n = 0$  para  $n > 5$ , na Eq. (44).

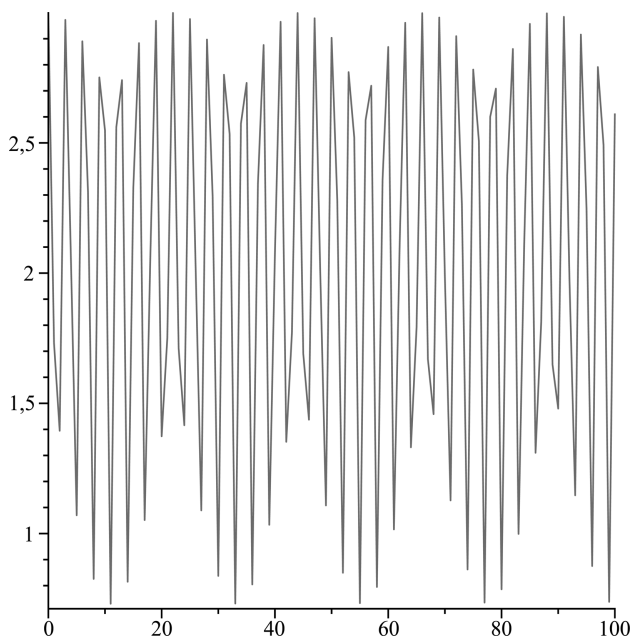


Figura 4 - Evolução temporal do valor esperado da posição  $\langle x \rangle$ .

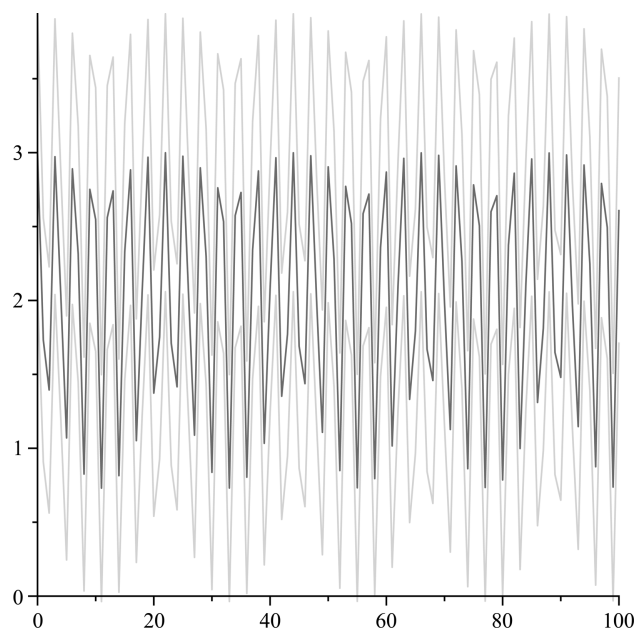


Figura 5 - Evolução temporal do valor esperado da posição  $\langle x \rangle$  (curva central, vermelha) e de  $\langle x \rangle + \sigma$  (curva superior, verde) e  $\langle x \rangle - \sigma$  (curva inferior, verde), em que  $\sigma$  é a incerteza.

#### 4. Oscilador anarmônico quártico na semi-reta

Nesta seção vamos estudar a quantização do oscilador anarmônico quártico, descrito pelo potencial

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + \lambda x^4, \quad (47)$$

sendo  $\lambda$  um parâmetro do sistema. Em cosmologia, as equações de Einstein para o fator de escala do universo em modelos homogêneos e isotrópicos de Friedmann-Robertson Walker assumem a forma da equação de um oscilador quártico, com a introdução da constante cosmológica [35, 36].

Aplicamos o método espectral ao potencial (47), com  $N = 100$  níveis, amplitude de intervalo  $L = 10$  e  $\lambda = 0.1$ . A Fig. 6 exibe os cinco autoestados de mais baixa energia para este sistema, com energias mostradas na Tabela 2.

Observamos que a diferença entre as energias dos estados fundamentais dos osciladores quártico e harmônico (caso  $\lambda = 0$ ) cresce com  $\lambda$  (vide Tabela 3). Isto nos indica que as diferenças entre os demais níveis de energia do espectro também crescem com  $\lambda$ .

Superpondo como indicado na Eq. (44) os cinco autoestados de energia mais baixa, fazendo  $C_n = 1$  para  $1 \leq n \leq 5$  e  $C_n = 0$  para  $n > 5$ , utilizamos as Eqs. (45) e (46) para calcular o valor esperado da posição e a

incerteza associada (vide Fig. 7).

Tabela 2 - Os cinco níveis de energia aproximados mais baixos do oscilador quártico (47), para  $\lambda = 0.1$ .

$n$	$E_n$
1	1.769502643960863
2	4.62888280895357
3	7.899767227980909
4	11.48731557948815
5	15.33864203954453

Tabela 3 - Comparação das energias dos estados fundamentais  $E_0^{(\lambda)}$  de diferentes osciladores anarmônicos quárticos (ou seja, para diversos valores de  $\lambda$ ) em relação a energia do estado fundamental  $E_0$  do oscilador harmônico ( $\lambda = 0$ ). Aqui consideramos  $\hbar = 1$ ,  $w = 1$  e  $E_0 = 1.4999999999999893$ .

$\lambda$	$\Delta E_0 = E_0^{(\lambda)} - E_0$
$10^{-15}$	$-6,0 \times 10^{-14}$
$10^{-10}$	$3,7501 \times 10^{-10}$
$10^{-5}$	$3,749793774 \times 10^{-5}$
$10^{-1}$	0,26950264394888
1,0	1,23789226800855
1,1	1,30515958633191
1,2	1,36896221923447
1,3	1,42972398398633
1,4	1,48779057921317
1,5	1,54344822140989
1,6	1,59693694939329
1,7	1,64846034132021
1,8	1,69819276148702
1,9	1,74628486117639
2,0	1,79286782142855

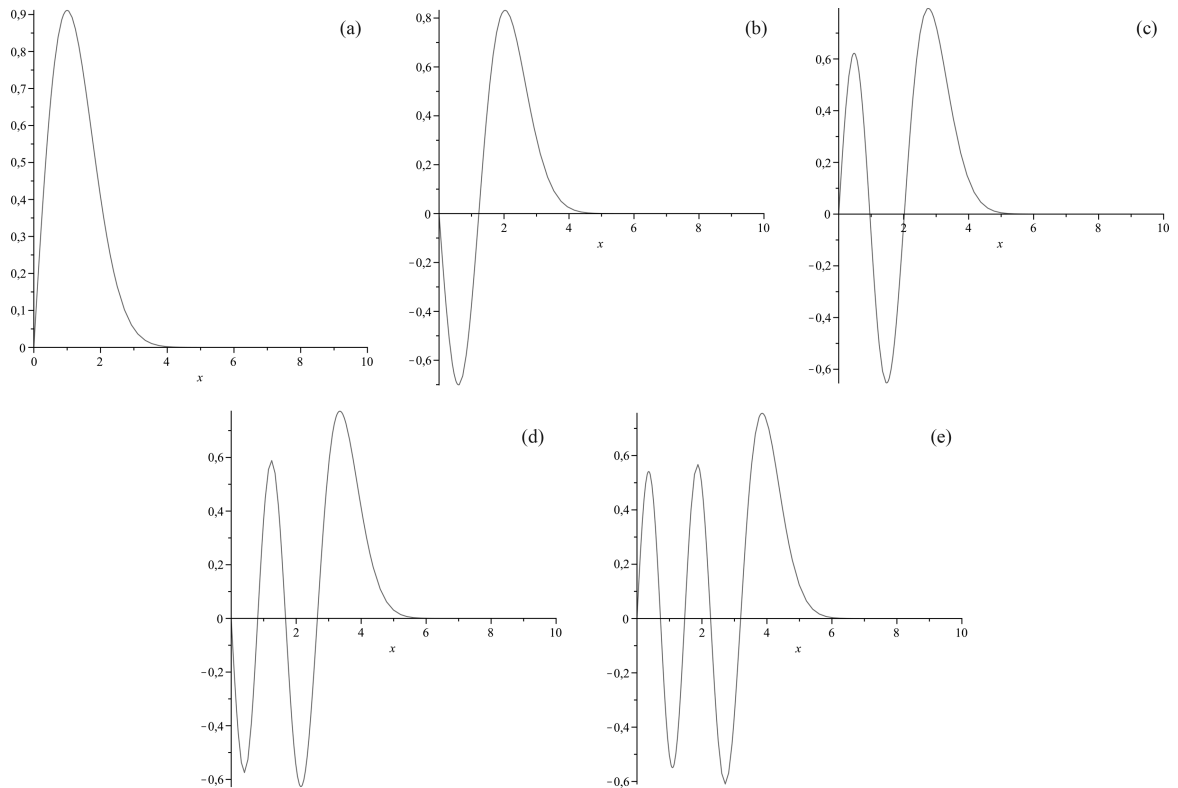


Figura 6 - Os cinco autoestados de mais baixa energia aproximados do oscilador anarmônico quártico na semi-reta (47) com  $\lambda = 0.1$ , associados aos autovalores da energia mostrados na Tabela 2.



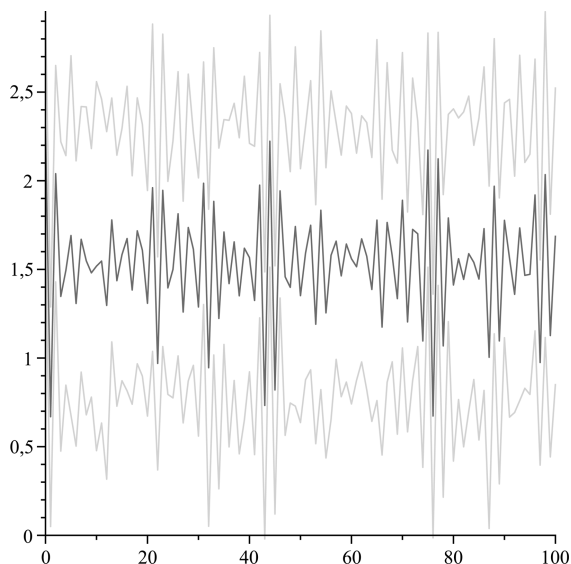


Figura 7 - Evolução no tempo do valor esperado da posição (curva em vermelho) e das incertezas associadas:  $\langle x \rangle + \sigma$  (curva em

verde superior) e  $\langle x \rangle - \sigma$  (curva em verde inferior).

Como não conhecemos a solução analítica do oscilador quártico, verificamos a precisão dos resultados numéricos observando a conservação da norma  $|\psi|^2$  do pacote de onda com o tempo, bem como a ortogonalidade dos autoestados aproximados, utilizando o pacote *Spectral* [33]. A erro da norma é inferior a  $10^{-14}$ . A Fig. 8 mostra o resultado dos produtos internos de cada um dos cinco autoestados aproximados de energia mais baixa com os estados de energia superior à sua. O resultado nunca é superior a  $10^{-14}$ . Idealmente, estes produtos internos seriam todos nulos.

Um outro teste consiste em verificarmos o quanto cada nível de energia varia, quando variamos o número de níveis de energia  $N$  utilizados na aproximação. A Fig. 9 mostra os desvios sofridos quando comparando os casos  $N = 100$  e  $N = 200$ .

Com base nos testes feitos, podemos afirmar que os resultados obtidos para o caso do oscilador anarmônico quártico apresentam excelente precisão.

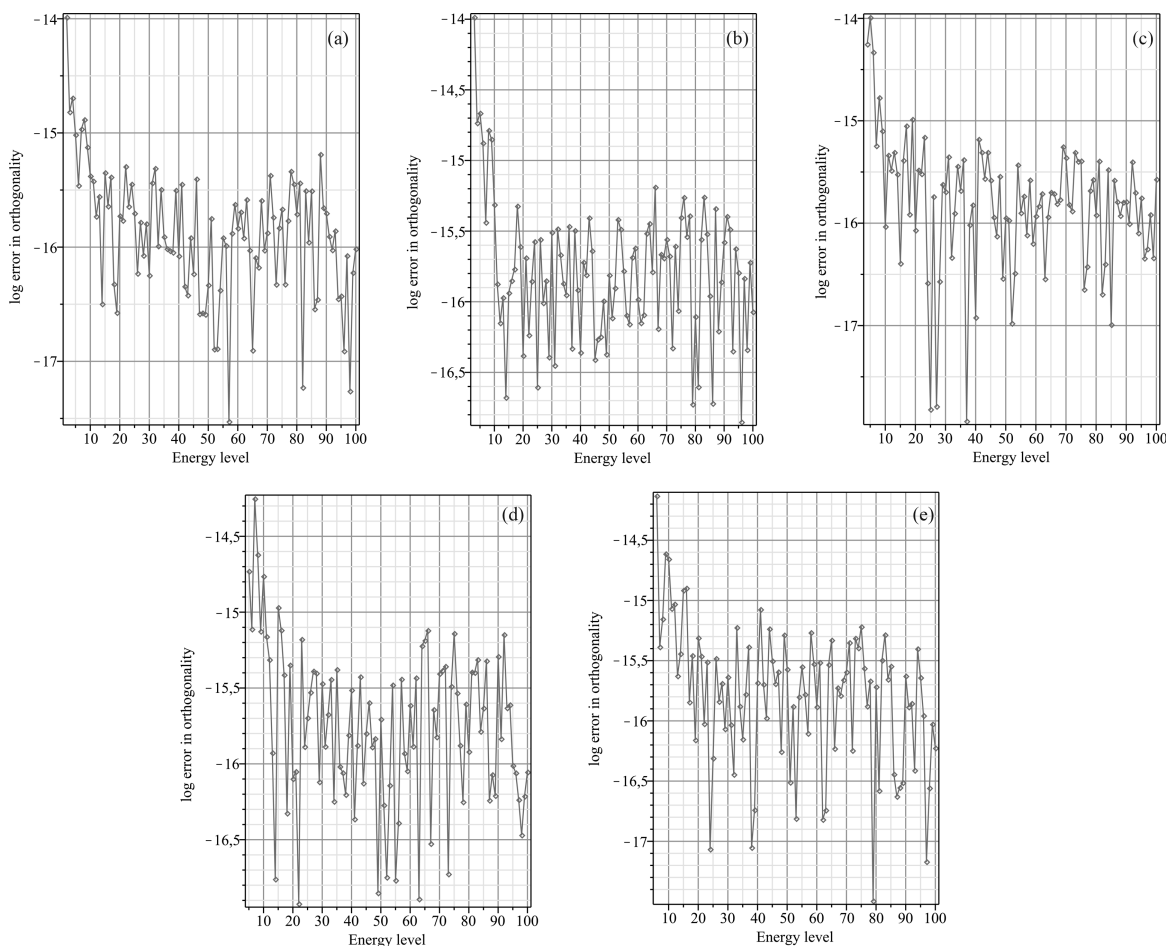


Figura 8 - Verificação da ortogonalidade das cinco autofunções aproximadas de mais baixa energia, com relação às demais autofunções, através do produto interno entre elas. Cada um dos gráficos compara um nível com os demais. O eixo horizontal indica os índices do nível de energia (1, 2, etc) sob comparação (e não os seus valores reais) e eixo vertical mostra o logaritmo do valor absoluto do produto interno de cada autofunção, para: (a) o nível fundamental, oscilando entre  $10^{-18}$  e  $10^{-14}$ ; (b) o primeiro nível excitado, oscilando entre  $10^{-17}$  e  $10^{-14}$ ; (c) o segundo nível excitado, oscilando entre  $10^{-18}$  e  $10^{-14}$ ; (d) o terceiro nível excitado, oscilando entre  $10^{-17}$  e  $10^{-13}$ ; (e) o quarto nível excitado, oscilando entre  $10^{-18}$  e  $10^{-14}$ . Observa-se que os níveis de mais baixa energia, em geral, apresentam melhor ortogonalidade com os demais níveis.

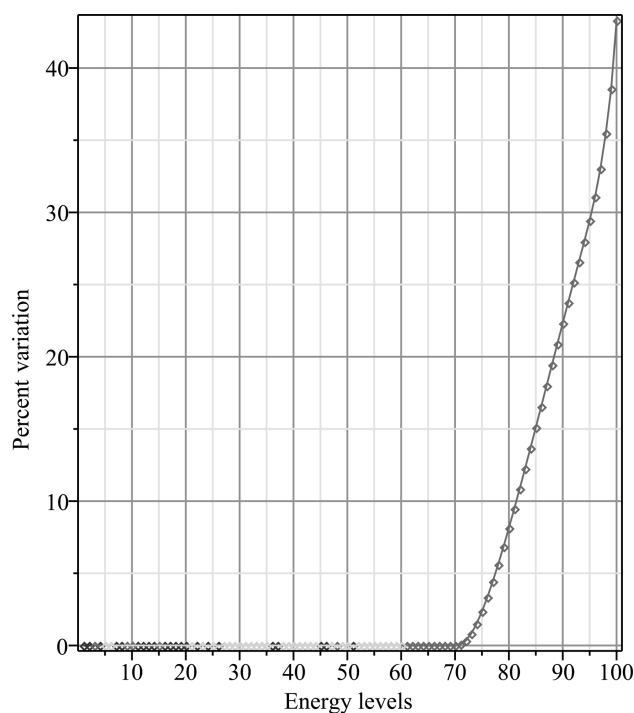


Figura 9 - Variação do valor absoluto dos níveis de energia, quando variamos o número de autoestados  $N$  de 100 para 200. Observe que somente a partir dos níveis superiores a 60 que o desvio torna-se relevante.

## 5. Conclusão e comentários finais

Apresentamos o método espectral de Galerkin de forma detalhada, aplicando-o posteriormente a dois sistemas físicos: o oscilador harmônico e o oscilador quártico, obtendo em cada caso o espectro de energia e as correspondentes autofunções. Para o oscilador harmônico, pudemos comparar os resultados fornecidos pelo método com os resultados analíticos, bem conhecidos, e também compará-los com os resultados do método de diferenças finitas. O método de Galerkin mostrou-se bem mais preciso. A dinâmica quântica desses sistemas pôde ser obtida através da construção de pacotes de onda, superposição dos autoestados para uma dada condição inicial. Calculamos então o valor esperado da coordenada espacial ( $\langle x \rangle$ ) e as incertezas associadas.

A simplicidade do método espectral de Galerkin permite sua abordagem em uma disciplina de graduação de mecânica quântica, sem muito gasto de tempo. A precisão deste método, quando comparado ao método de diferenças finitas, torna este método uma atraente alternativa para estudantes de graduação e pós-graduação em física. Além disso, o método espectral é de ampla aplicabilidade, não somente à equação de Schrödinger, mas também a equações mais gerais como a equação de Wheeler-DeWitt, utilizada na quantização de modelos em relatividade geral.

## Agradecimentos

G.A. Monerat agradece a FAPERJ. L.B. Leal (Bolsista PIBIC/UERJ) agradece à UERJ pela bolsa de Iniciação Científica concedida. Este trabalho foi parcialmente realizado no Laboratório de Computação Avançada (LCA) do Depto. de Matemática, Física e Computação da Faculdade de Tecnologia da UERJ.

## Referências

- [1] M. Alonso e E.J. Finn, *Física: Um Curso Universitário. Volume 1, Mecânica* (Edgard Blücher, São Paulo, 1972), 12ª reimpr., 2005.
- [2] J.D. Jackson, *Classical Electrodynamics* (John Wiley & Sons, New York, 1998), 3ª ed.
- [3] F.A.G. Parente, A.C.F. dos Santos e A.C. Tort, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **35**, 4301 (2013).
- [4] C.H. Cardona, M.K. de Carli Silva e C.G. Fernandes, *Computação Quântica: Complexidade e Algoritmos*, disponível em <https://linux.ime.usp.br/~cef/mac499-04/monografias/cardona/quantum.pdf>, acessado em 27/01/2014.
- [5] K. Bourzac, *Quantum Dots Go On Display*. *Nature International Weekly Journal of Science*, 15/01/2013. Disponível em <http://www.nature.com/news/quantum-dots-go-on-display-1.12216>, acessado em 27/01/2014.
- [6] I.M. Greca, M.A. Moreira e V.E. Herscovitz, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **23**, 444 (2001).
- [7] S.N. Biswas, K. Datta, R.P. Saxena, P.K. Srivastava and V.S. Varma, *J. Math. Phys.* **14**, 9 (1973).
- [8] L. De Falco, R. Mignani and R. Scipioni, *Europhys. Lett.* **36** 81 (1996).
- [9] F.M. Fernandez, *Physical Review A* **44**, 3336 (1991).
- [10] S.C. Chhajlany, D.A. Letov and V.N. Malnev, *J. Phys. A: Math. Gen.* **24**, 2731 (1991).
- [11] S.C. Chapra and R.P. Canale, *Numerical Methods for Engineers* (McGraw-Hill, São Paulo 1988), second edition.
- [12] D. Gottlieb and S. Orzag, *Numerical Analysis of Spectral Methods: Theory and Applications* (SIAM, Philadelphia, 1977).
- [13] David J. Griffiths, *Introduction Quantum Mechanics* (Prentice Hall, 1995).
- [14] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory* (Pergamon, Oxford, 1977), 3rd ed.
- [15] P. Pedram, M. Mirzaei, S. Jalalzadeh and S.S. Gousheh, *Gen Relativ Gravit* **40**, 16631681 (2008).
- [16] G. Oliveira-Neto, G. A. Monerat, E.V. Corrêa Silva, C. Neves, L.G. Ferreira Filho, *International Journal of Modern Physics: Conference Series* **3**, 254 (2011).
- [17] G. Oliveira-Neto, G.A. Monerat, E.V. Corrêa Silva, C. Neves, L.G. Ferreira Filho, *Int. J. Theor. Phys.* **52**, 29916 (2013).
- [18] P. Pedram, M. Mirzaei and S.S. Gousheh, *Comput. Phys. Commun.* **176**, 581 (2007).

- [19] Pouria Pedram and Shahram Jalalzadeh, *General Relativity and Gravitation* **42**, 745 (2010).
- [20] R. Arnowitt, S. Deser and C.W. Misner, *Phys. Rev.* **116**, 1322 (1959).
- [21] N.A. Lemos, *Mecânica Analítica* (Editora Livraria da Física, São Paulo, 2004) 1 ed., v. 1. 386 p.
- [22] P.A. Dirac, *Lectures on Quantum Mechanics* (Dover Publications, New York, 2001).
- [23] B.S. DeWitt, *Phys. Rev.* **160**, 1113 (1967).
- [24] J.S. Islan, *An Introduction to Mathematical Cosmology* (Cambridge University Press, 2004), second edition.
- [25] B.F. Schutz, *Phys. Rev. D* **2**, 2762 (1970); *Phys. Rev. D* **4**, 3559 (1970).
- [26] F.G. Alvarenga, J.C. Fabris, N.A. Lemos and G.A. Monerat, *General Relativity and Gravitation* **34**, 651 (2002).
- [27] H. Sagan, *Boundary and Eigenvalue Problems in Mathematical Physics* (Dover, Mineola, 1989).
- [28] P.A.M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics* (Clarendon Press, Oxford, 1967), 4th ed.
- [29] N.A. Lemos, *J. Math. Phys.* **37**, 1449 (1996).
- [30] R.F.S. Andrade, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **13**, 168 (1983).
- [31] D.J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics* (Prentice Hall, New Jersey, 1995).
- [32] E.V. Corrêa Silva, G.A. Monerat, G. Oliveira-Neto and L.G. Ferreira Filho, *Computer Physics Communications* **185**, 380 (2013).
- [33] E.V. Corrêa Silva, G.A. Monerat, G. Oliveira-Neto and L.G. Ferreira Filho, *Spectral*. 2013. The Spectral package - PC library International Physics Program Library at AEQQ\_v1.0. 2013. Program summary. Disponível em [http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/AEQQ\\_v1\\_0.html](http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/AEQQ_v1_0.html), acessado em 27/01/2014.
- [34] G.A. Monerat, L.G. Ferreira Filho, E.V. Corrêa Silva, G. Oliveira-Neto, P.H.A.S. Nogueira e A.R.P. de Assumpção, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **32**, 1304 (2010).
- [35] G.A. Monerat, E.V. Corrêa Silva, G. Oliveira-Neto, L.G. Ferreira Filho and N.A. Lemos, *Physical Review D* **73**, 044022(2006).
- [36] J. Acacio de Barros, E.V. Corrêa Silva, G.A. Monerat, G. Oliveira-Neto, L.G. Ferreira Filho and P. Romildo Jr., *Physical Review D* **75**, 104004 (2007).