

Métodos Computacionais em Física: Mecânica Quântica

Aula: Tunelamento.

Mecânica Quântica

Eq. de Schrödinger: evolução temporal.

- ✓ Métodos de Euler e Runge-Kutta
- ✓ Cálculo da Energia
- Tunelamento

Mecânica Quântica

Eq. de Schrödinger: evolução temporal.

- ✓ Métodos de Euler e Runge-Kutta
- ✓ Cálculo da Energia

 **Tunelamento**

Aula: Tunelamento - Objetivos

Ao final desta aula, você deverá ser capaz de:

- 1) Simular a evolução temporal de um pacote de onda tunelando através de uma barreira quadrada em 1D.
- 2) Calcular os coeficientes de transmissão e reflexão relacionados a este “espalhamento”.

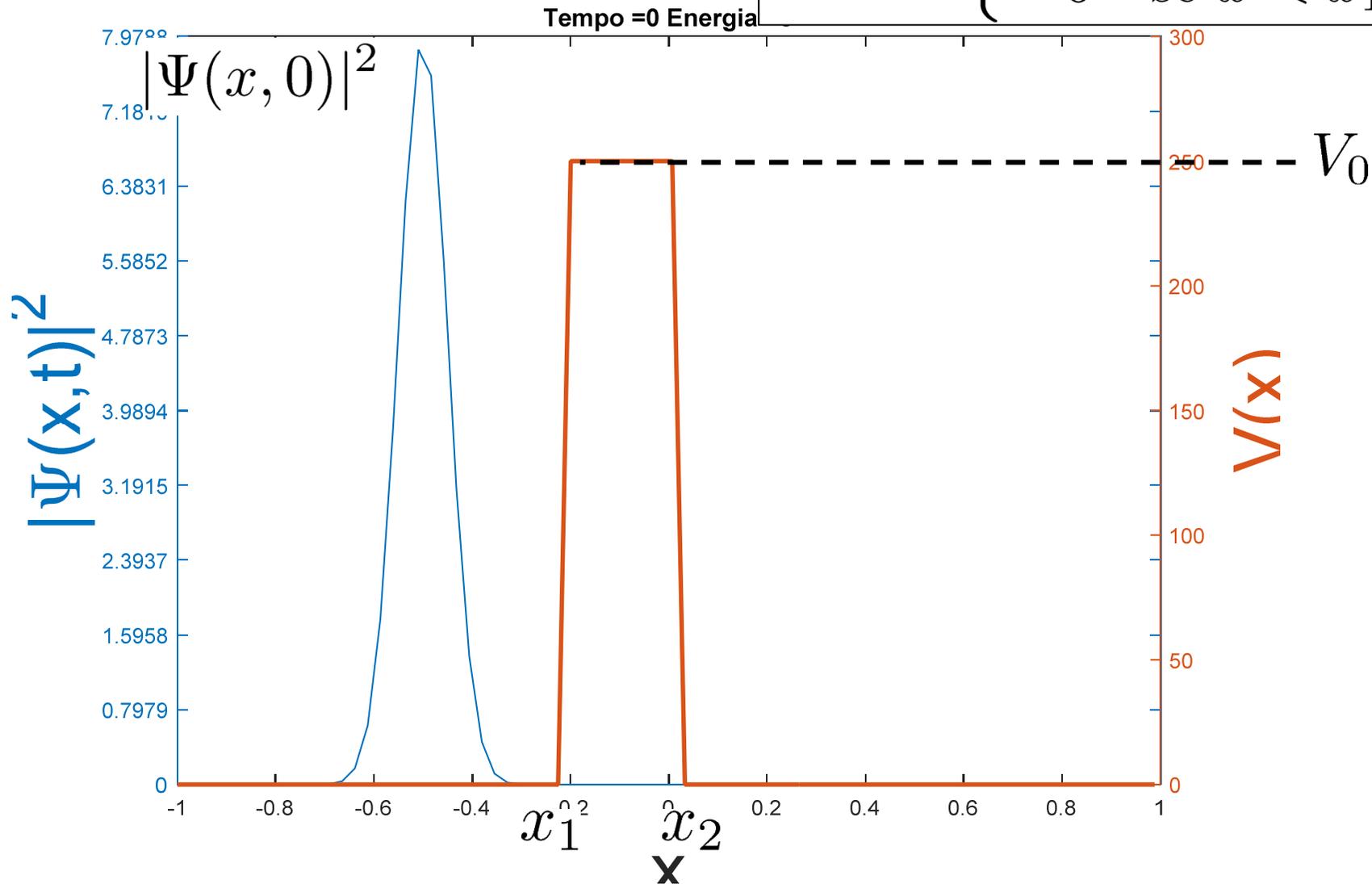
Tarefa: Cálculo dos coeficientes de transmissão e reflexão em função do tempo de um pacote de onda gaussiano sendo “espalhado” (e tunelando) por uma barreira quadrada.

Tempo aproximado: 30 a 40 min (**lembrando que o *debug* é a maior parte disso!**).

Tunelamento em Mecânica Quântica

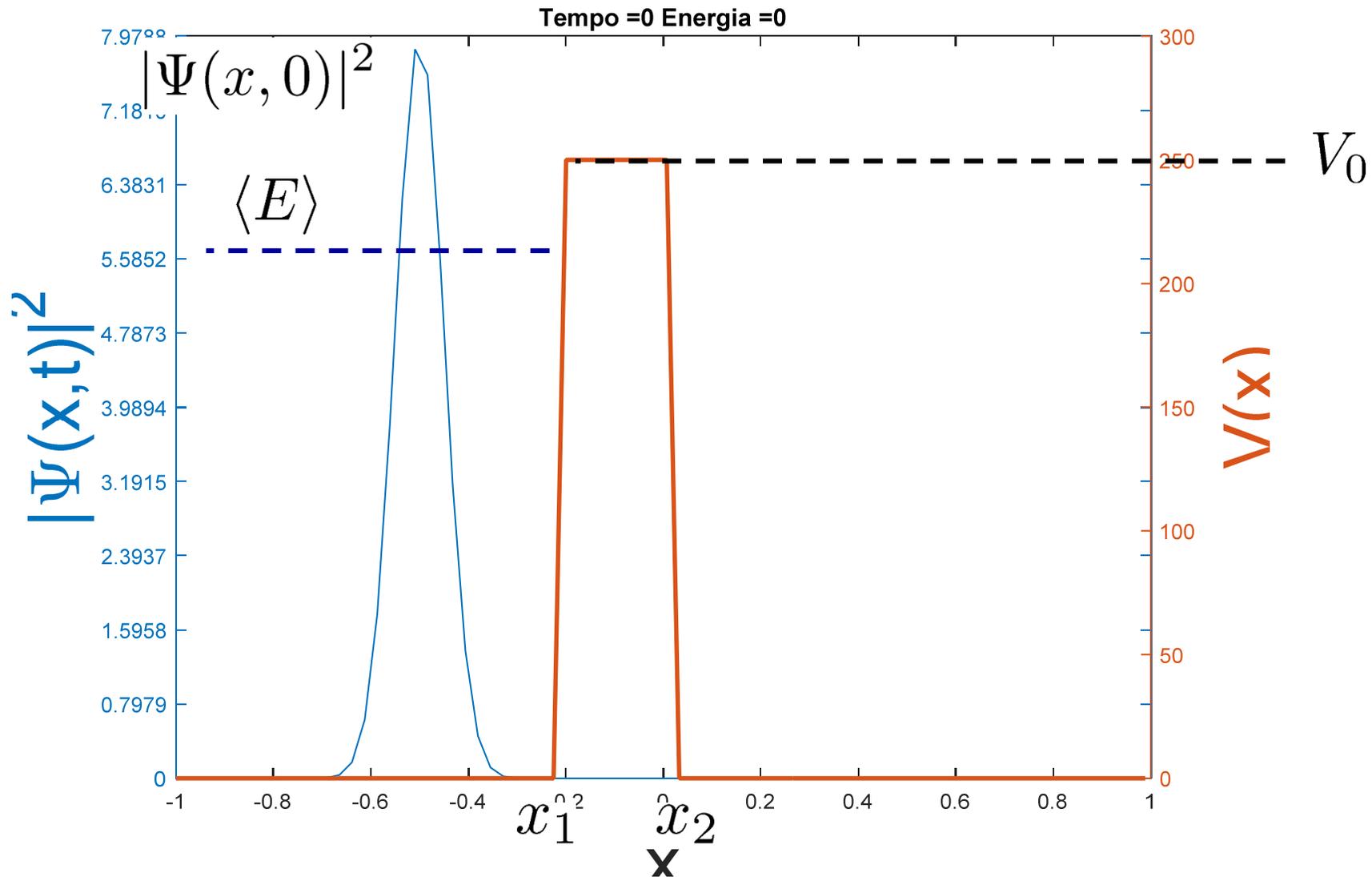
- Potencial tipo “barreira quadrada”.

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



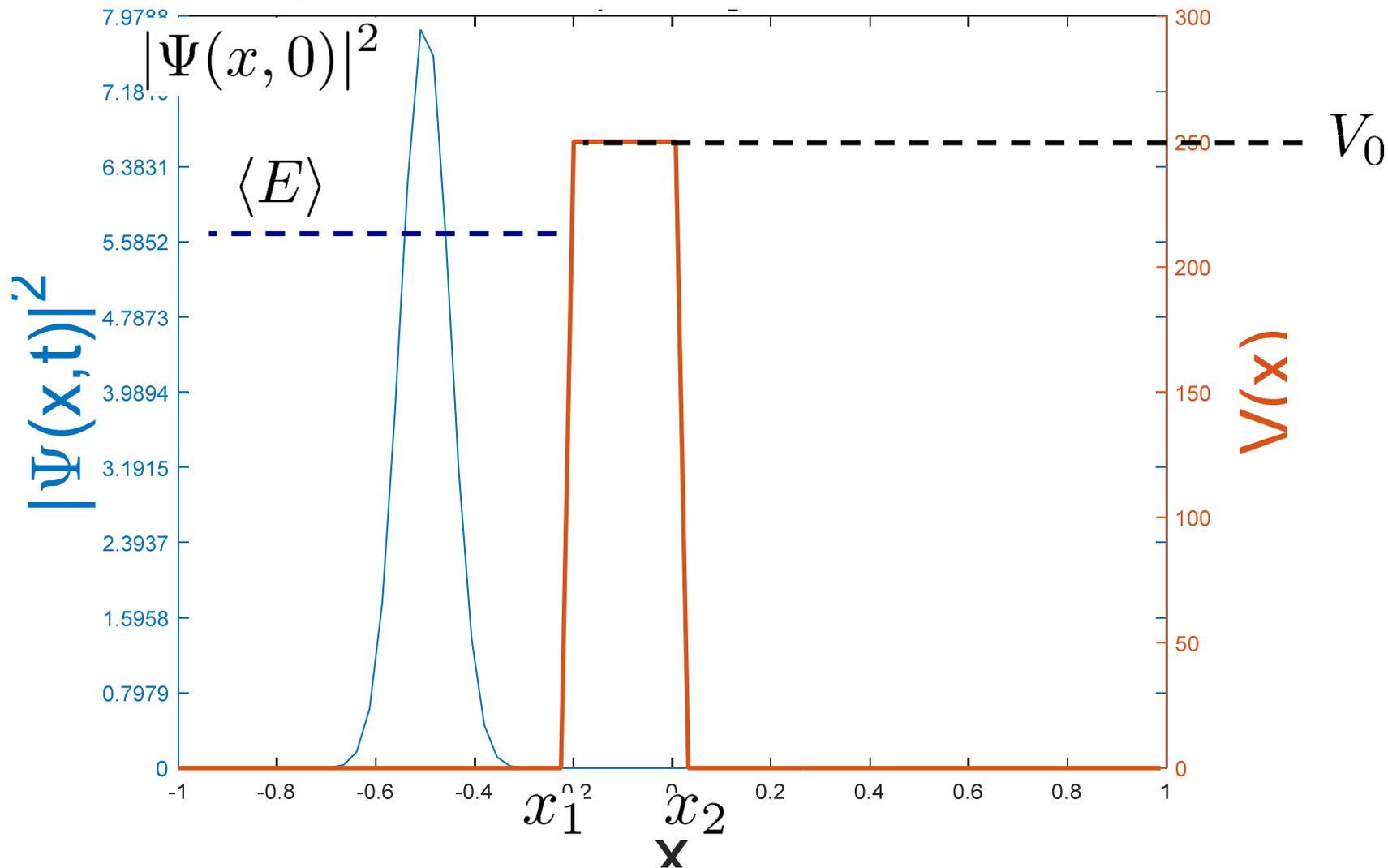
Tunelamento em Mecânica Quântica

- O estado $\Psi(x, t)$ tem associado uma energia média $\langle E \rangle$



Tunelamento em Mecânica Quântica

- Pergunta: se $\langle E \rangle < V_0$, o que acontece com $\Psi(x, t)$ à medida que seu centro se aproxima da barreira?



Coeficiente de transmissão

- Classicamente, se $E < V_0$, a partícula *sempre é refletida* pela barreira.
- Em Mecânica Quântica, mesmo para $\langle E \rangle < V_0$, existe uma probabilidade não nula de se medir a partícula em uma posição $x > x_2$ em um tempo suficientemente grande.
- Como vimos, a probabilidade de medir a partícula em uma posição $x > x_2$ e num tempo t é dada por:

$$T(t) = \frac{\int_{x_2}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx}$$

- Para tempos grandes, T dará informação sobre a **probabilidade de transmissão** do pacote através da barreira.

Coeficiente de reflexão

- Obviamente, também podemos definir a probabilidade de medir a partícula em uma posição $x < x_1$ e num tempo t :

$$R(t) = \frac{\int_{-\infty}^{x_1} |\Psi(x, t)|^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx}$$

- Para tempos curtos ($t=0$, por exemplo), $R=1$ uma vez que o pacote está inicialmente localizado antes da barreira.
- Para tempos grandes, R dará informação sobre a *reflexão* do pacote pela barreira.
- Pergunta: como $R(t)$ e $T(t)$ se comportam em função da energia inicial?

Aula 23 – Tarefa (fazer upload).

Calcule $\Psi(x,t)=R(x,t)+ i I(x,t)$ via **RK2** e

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

- *Condição inicial (normalizada):* $\Psi(x, t=0) = \sqrt{\frac{e^{-(x-x_c)^2/(2\sigma^2)}}{\sigma\sqrt{2\pi}}} e^{ik_0x}$
- *Condições iniciais:* $x_c=-0.5$, $\sigma=0,05$ e $k_0=20$ (depois use $k_0=30$).
- *Potencial:* $V_0=250$ e $x_1=-0.2$ e $x_2=0$.
- *Calcule $\Psi(x,t)$ entre $-1 \leq x \leq 1$ de $t=0$ a $t=0,04$ com passo $\Delta t=0,0001$ e $r=\Delta t/2\Delta x^2 = 0.075$ (determine o Δx a ser usado).*
- *Para cada passo no tempo, calcule as integrais (numéricas):*

$$E(t) = \int_{-1}^1 \Psi^*(x, t) [\hat{H} \Psi(x, t)] dx$$

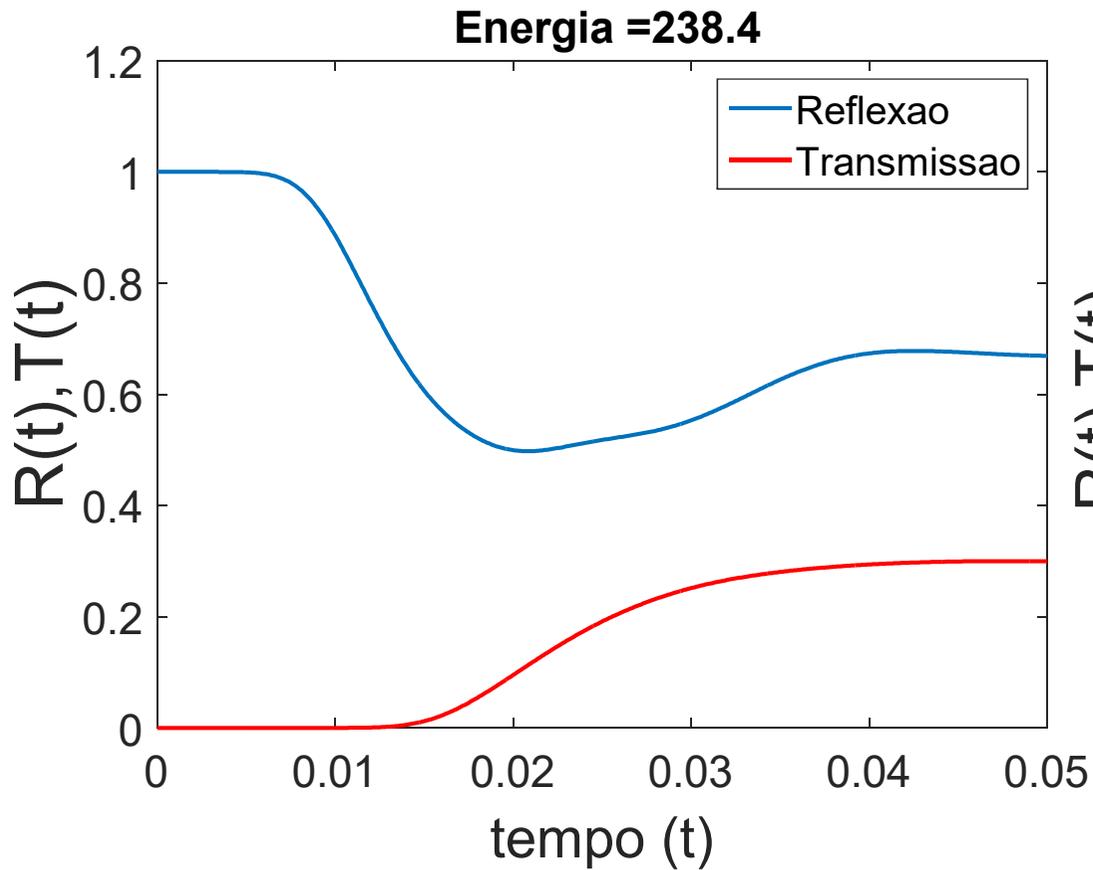
$$R(t) = \int_{-1}^{x_1} |\Psi(x, t)|^2 dx$$

$$T(t) = \int_{x_2}^1 |\Psi(x, t)|^2 dx$$

- *Faça um gráfico de $R(t)$ e $T(t)$.*
- *O que você espera? E se $k_0 = 30$? E $k_0 = 10$? **Discuta no script!***

Spoiler:

$k_0=20$ $\langle E \rangle < V_0$



$k_0=30$ $\langle E \rangle > V_0$

