Mecânica Quântica

Eq. de Schrödinger: evolução temporal.

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

Equação de Schrödinger

- Em Mecânica Quântica, a *função de onda* $\Psi(x,t)$ (complexa) de uma partícula de massa *m* e sujeita a um potencial *V(x)* (1D) obedece a *Eq. de Schrödinger*:

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

- Interpretação probabilistica de $|\Psi(x,t)|^2$:

a integral $\int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x,t)|^2 \, dx$ representa a *probabilidade* de encontrar a partícula entre as posições x_1 e x_2 no instante *t*.

  - Logo, é importante que $|\Psi(x,t)|^2$ seja *normalizada*:

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

Equação de Schrödinger

- Como $\Psi(x,t)$ é complexa, podemos escrever: $\Psi(x,t) = \mathcal{R}(x,t) + i\mathcal{I}(x,t)$
onde R(x,t) e I(x,t) são funções reais.

- Substituindo $\Psi(x,t) = \mathcal{R}(x,t) + i\mathcal{I}(x,t)$ na Eq. de Schrödinger, obtemos um sistema de duas equações acopladas (mostre isso!)

$$\begin{cases} \hbar \dfrac{\partial \mathcal{R}(x,t)}{\partial t} & = & -\dfrac{\hbar^2}{2m} \dfrac{\partial^2 \mathcal{I}(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\mathcal{I}(x,t) \\ \hbar \dfrac{\partial \mathcal{I}(x,t)}{\partial t} & = & +\dfrac{\hbar^2}{2m} \dfrac{\partial^2 \mathcal{R}(x,t)}{\partial x^2} - V(x)\mathcal{R}(x,t) \end{cases}$$

- As soluções estão sujeitas ao vínculo: $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} (\mathcal{R}(x,t))^2 \, dx + \int_{-\infty}^{\infty} (\mathcal{I}(x,t))^2 \, dx = 1$

- Por simplicidade, usaremos unidades em que $\hbar = m = 1$

Solução Numérica da Equação de Schrödinger

Contínua

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \mathcal{R}(x,t)}{\partial t} = -\dfrac{1}{2}\dfrac{\partial^2 \mathcal{I}(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\mathcal{I}(x,t) \\ \dfrac{\partial \mathcal{I}(x,t)}{\partial t} = +\dfrac{1}{2}\dfrac{\partial^2 \mathcal{R}(x,t)}{\partial x^2} - V(x)\mathcal{R}(x,t) \end{cases}$$

Discretizando: $\boxed{x_i = (i-1)\,\Delta x}$ $\boxed{t_n = (n-1)\,\Delta t}$

$$V(x_i) \to V(i) \qquad \mathcal{R}(x_i,t_n) \to \mathcal{R}(i,n) \qquad \mathcal{I}(x_i,t_n) \to \mathcal{I}(i,n)$$

"Método de Euler"

$$\begin{cases} \dfrac{\mathcal{R}(i,n+1) - \mathcal{R}(i,n)}{\Delta t} = -\dfrac{1}{2}\dfrac{\mathcal{I}(i+1,n) - 2\mathcal{I}(i,n) + \mathcal{I}(i-1,n)}{\Delta x^2} + V(i)\mathcal{I}(i,n) \\ \dfrac{\mathcal{I}(i,n+1) - \mathcal{I}(i,n)}{\Delta t} = +\dfrac{1}{2}\dfrac{\mathcal{R}(i+1,n) - 2\mathcal{R}(i,n) + \mathcal{R}(i-1,n)}{\Delta x^2} - V(i)\mathcal{R}(i,n) \end{cases}$$

Solução Numérica da Equação de Schrödinger

- Com fizemos na solução da equação de difusão, definimos: $r = \dfrac{\Delta t}{2\Delta x^2}$

Evolução temporal via "Método de Euler" (sistema de 2 equações acopladas)

$$\begin{cases} \mathcal{R}(i,n+1) &= \mathcal{R}(i,n) - r\left[\mathcal{I}(i+1,n) - 2\mathcal{I}(i,n) + \mathcal{I}(i-1,n)\right] + V(i)\mathcal{I}(i,n)\Delta t \\ \mathcal{I}(i,n+1) &= \mathcal{I}(i,n) + r\left[\mathcal{R}(i+1,n) - 2\mathcal{R}(i,n) + \mathcal{R}(i-1,n)\right] - V(i)\mathcal{R}(i,n)\Delta t \end{cases}$$

- Podemos usar r≤ 1 e o passo em x será dado por $\Delta x = \sqrt{\dfrac{\Delta t}{2r}}$
- Lembrando que, em princípio a norma se conserva para todo n:

$$\sum_{i=1}^{N} \left[(\mathcal{R}(i,n))^2 + (\mathcal{I}(i,n))^2\right] \Delta x \approx 1$$

- Pergunta: esse método funciona???

Simulação

Calcule $\Psi(x,t)=R(x,t)+ i\, I(x,t)$ via método de Euler com $V(x)=0$.

- *Condição inicial (normalizada):* $\Psi(x,t=0) = \sqrt{\frac{e^{-(x-x_c)^2/(2\sigma^2)}}{\sigma\sqrt{2\pi}}}\, e^{ik_0 x}$
- *Note que* $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,0)|^2\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-(x-x_c)^2/(2\sigma^2)}}{\sigma\sqrt{2\pi}}\, dx = 1$
- *Calcule $\Psi(x,t)$ entre $-1 \leq x \leq 1$ de $t=0$ a $t=0,03$ com passo $\Delta t=0,0001$ e $r=\Delta t/2\Delta x^2 =0.075$ (determine o Δx a ser usado).*
- *Resultados para:*
  - $x_c=-0.5$, $\sigma=0,1$ e $k_0=20$

É possível fazer melhor do que isso?

Sim (Runge-Kutta 2a ordem)-> Vide Aula 9 (Pêndulo duplo)

Aula 21 – Tarefa (p/ a próxima aula)

Escreva (em uma folha) o algorítmo de RK2 para resolver o sistema:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \mathcal{R}(x,t)}{\partial t} & = & -\dfrac{1}{2}\dfrac{\partial^2 \mathcal{I}(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\mathcal{I}(x,t) \\ \dfrac{\partial \mathcal{I}(x,t)}{\partial t} & = & +\dfrac{1}{2}\dfrac{\partial^2 \mathcal{R}(x,t)}{\partial x^2} - V(x)\mathcal{R}(x,t) \end{cases}$$

Dicas e perguntas para ter em mente.

- *Faça primeiro a discretização da derivada em x e pense nos lados direitos do sistema como as "f's" do slide 7 da Aula 9 (atachado).*
- *Note que tanto os k1s quanto os k2s serão funções de x.*
- *Quantos k1s e k2s tem que ser calculados?*
- *É possível calcular os k1s e k2s dentro do mesmo loop em (x_i)?*

RK2 para N eq. diferenciais acopladas

$$\begin{cases} \dfrac{dx_1}{dt} & = & f_1(x_1, ..., x_N) \\ \dfrac{dx_2}{dt} & = & f_2(x_1, ..., x_N) \\ & (\ldots) & \\ \dfrac{dx_N}{dt} & = & f_N(x_1, ..., x_N) \end{cases}$$

Definimos um "k1" para cada um dos $x_n(t)$:

$$k_1^n = f_n(x_1(t), \ldots, x_N(t))\ \Delta t$$

Defininos os "valores em meio passo":

$$x_n(t + \Delta t/2) = x_n(t) + k_1^n/2$$

Finalmente, definimos os "k2":

$$k_2^n = f_n\left[x_1\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right), \ldots, x_N\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right)\right]\ \Delta t$$

e "avançamos" no tempo:

Método de Runge-Kutta
de 2a ordem (**RK2**):

$$\boxed{x_n(t + \Delta t) = x_n(t) + k_2^n}$$

Ou seja, **dados todos os** $x_n(t)$, podemos calcula-los em t+ Δt:

Comparação Euler vs RK2