F4021 Métodos Computacionais em Engenharia
Problema de avaliação 2
DFA–FCUP 2020-21
14 de Novembro de 2020

1. Pretende-se com este problema fazer um estudo numérico de uma equação parabólica, a equação de Schrödinger dependente do tempo:

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

   Pretendemos estudar o que se passa quando um pacote de ondas incide num potencial (barreira ou poço) localizado. Pode consultar a Ref. [1].

   (a) Escreva um programa que lhe permita propagar no tempo um pacote de onda gaussiano incidente da esquerda ($x < 0$), com energia E (ou use k) sobre um potencial situado na região perto de $x = 0$, usando o método de Crank-Nicolson. Deve permitir usar diferentes potenciais.

   (b) Existem potenciais para os quais, para certos valores de parâmetros, a transmissão é total. Um exemplo é o potencial:

$$V(x) = -\frac{s(s+1)}{\cosh^2 x,}$$

   para o qual não há reflexão quando s é um inteiro. Estude a transmissão e reflexão de um pacote gaussiano num potencial limitado ao intervalo $x \in [-100, 100]$, nos seguintes casos:

      i. s semi-inteiro (p.ex. $s = 4.5$);
      ii. s inteiro (p.ex. $s = 10$).

   Em cada caso estude a razão entre probabilidade do pacote transmitido $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \, dx$ e do pacote incidente, para vários valores da energia (deve escolher valores de tal modo que tenha variações apreciáveis entre o quociente de transmissão para os vários valores).

Nota: o integral de cada um dos pacotes não pode realmente ser até ao "infinito"(leia-se, limites da janela de computação), de cada lado da barreira, caso contrário não os distingue.

Referências

[1] Mecânica Quântica, C. Cohen-Tannoudji, B. Liu and F. Lalöe, especialmente complementos M,N do capítulo 4.