Projectos Física Computacional

Os projectos devem ser fornecidos com código fonte e powerpoint da apresentação oral do trabalho. Da apresentação deve constar:

- Motivação
- Descrição da implementação(ões) numérica(s).
- Apresentação e discussão dos resultados obtidos.
- Conclusão.

Os projectos devem ser realizados em grupos de 2 a 3 elementos. Entrega do projecto até à data da apresentação oral.

Apresentação oral do projecto computacional: 25 de Janeiro 14h.

Projecto 1 Movimento de projéctil com resistência do ar

Considere o movimento de um projéctil, de massa *M*, lançado com velocidade inicial v_0 fazendo um ângulo α com a horizontal. Durante o seu movimento o projéctil está sujeito à acção da força gravítica (g=9.8 ms^{-2}) e da força de resistência do ar dada por

$$\vec{F}_{atrito} = -B_2 \frac{\rho(y)}{\rho_0} \mathrm{v}^2 \hat{\mathrm{v}} \, ,$$

onde B_2 é o coeficiente de atrito, $\rho(y)$ a densidade do ar a uma altura y, ρ_0 a densidade do ar ao nível do mar(y=0), v a velocidade com que se desloca o corpo.

Faça um programa capaz de calcular a posição, velocidade e aceleração do projéctil dados v_0 , α, B_2/M.

1)Demonstre o funcionamento do programa comparando a trajectória do projéctil com e sem consideração da resistência do ar. Considere por exemplo v_0=700m/s, $B_2/M=4\times10^{-5}\ m^{-1}$.

2) Compare os métodos e integração de Euler e Runge Kutta 4ª ordem, teste os métodos usando vários valores para o passo de tempo.

3) Introduza o efeito da presença do vento usando a seguinte expressão

$$\vec{F}_{atrito} = -B_2 \frac{\rho(y)}{\rho_0} \left|\vec{\mathrm{v}} - \vec{\mathrm{v}}_{vento}\right| \left(\vec{\mathrm{v}} - \vec{\mathrm{v}}_{vento}\right)$$

Qual o efeito sobre as trajectórias do facto do vento ser a favor ou contra.

Projecto 2 Movimento Planetário.

Considere um sistema solar hipotético, com um planeta em órbita em torno do sol. Assume-se que a massa do sol é suficientemente elevada de modo que o seu movimento pode ser desprezado. A única força que actua no planeta é a gravidade dada pela lei de gravitação de Newton:

$$F_G = \frac{GMm}{r^2}$$

onde M é a massa do sol, m a massa do planeta , r a distância entre eles e G a constante de gravitação.

1) Faça um programa para calcular aposição da terra em função do tempo.

Use para as distâncias unidades astronómicas. No caso da Terra r=1 AU. Para estimar a velocidade inicial imponha uma órbita circular. (use $GM=4\pi^2\ AU^3/ano^2$). Use os vários métodos de integração de EDO. Calcule a energia total do sistema e verifique qual dos métodos conserva a energia exactamente.

2) Calcule a orbita de mercúrio. Use a velocidade inicial dada por

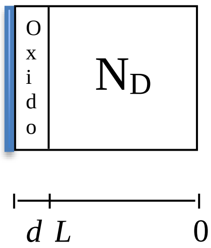
$v_0 = \sqrt{\frac{GM(1-e)}{a(1+e)}}$ assuma a=0.39 AU e excentricidade e=0.206 e ainda r=a(1+e).

Determine a velocidade do planeta no periélio e no afélio.

3)Considere agora o caso da presença de um segundo planeta. Calcule as órbitas dos 2 planetas (Marte e Júpiter). Despreze o movimento do sol.

Considere $M_{jupiter}/M_{sol}=9.5\text{x}10^{-4}$; $r_{jupiter}=5.2$ AU e $M_{Marte}/M_{sol}=3.3\text{x}10^{-7}$ e $r_{Marte}=1.52$ AU

Projecto 3 Junção MIS



Considere uma junção metal oxido semicondutor tipo n (MOS) em equilíbrio. O potencial electrostático na junção pode ser descrito simplesmente pela equação de Poisson

$$\frac{d^2V}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon_s} = -\frac{e}{\varepsilon_s}\left(N_D(x) + p(x) - n(x)\right), \qquad (1)$$

onde N_D, $n(x)$, $p(x)$ são os perfis de impurezas dadoras, a densidade de electrões e a densidade de lacunas, respectivamente. A densidade de lacunas e de electrões são dados por

$$p(x) = n_i e^{-\frac{eV}{k_B T}}$$
$$n(x) = n_i e^{\frac{eV}{k_B T}}.$$

Pretende-se desenvolver um programa para calcular o perfil de potencial electrostático no interior da junção MOS em equilíbrio, usando a equação de Poisson sujeita às seguintes condições fronteira:

$$V(0) = 0$$
$$V(L + d) = V$$

Use o método das diferenças finitas para discretizar o problema. Demonstre o funcionamento do programa calculando o perfil da densidade de carga ρ(x), de potencial electrostático e de campo eléctrico, E(x), para $N_D = 10^{14} - 10^{17}$ cm^{-3}. Represente a tensão na interface oxido semicondutor. Estime a capacidade total da junção em função da tensão aplicada. Estime a largura da zona de depleção (região em que E(x) $\neq$0) em função da concentração de impurezas.

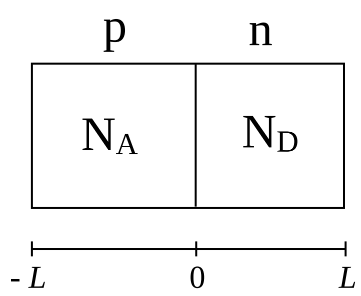
Dados para o problema.

O material semiconductor é o sílicio: Constante dieléctrica = 11.7 n_i= 1.02x10^{10} cm^{-3}

Os restantes parâmetros da junção são:

L= 5μm, d=100 nm, T = 300K , N_D(x)=Constant

Projecto 4 Junção pn.



Considere uma junção semicondutora pn em equilíbrio. O potencial electrostático na junção pode ser descrito simplesmente pela equação de Poisson

$$\frac{d^2V}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon_s} = -\frac{e}{\varepsilon_s}\left(N_D(x) - N_A(x) + p(x) - n(x)\right), \tag{1}$$

onde N_D, N_A, $n(x)$, $p(x)$ são os perfis de impurezas dadoras, aceitadoras, a densidade de electrões e a densidade de lacunas, respectivamente. A densidade de lacunas e de electrões são dados por

$$p(x) = n_i e^{-\frac{eV}{k_BT}}$$
$$n(x) = n_i e^{\frac{eV}{k_BT}}.$$

Pretende-se desenvolver um programa para calcular o perfil de potencial electrostático no interior de uma junção semicondutora pn em equilíbrio, usando a equação de Poisson sujeita às seguintes condições fronteira:

$$V(-L) = 0$$
$$V(L) = V_{bi} = \frac{k_BT}{e}\ln\left(\frac{N_D N_A}{n_i^2}\right).$$

Use o método das diferenças finitas para discretizar o problema. Demonstre o funcionamento do programa calculando o perfil da densidade de carga ρ(x), de potencial electrostático e de campo eléctrico, E(x), para uma junção simétrica, $N_D = N_A$, e uma assimétrica $N_D = 100\ N_A$. Estime a largura da zona de depleção (região em que $E(x) \neq 0$) em função da concentração de impurezas para uma junção simétrica.

Dados para o problema.

Vamos supôr que o material semiconductor é o sílicio:

Constante dieléctrica = 11.7 n_i= 1.02x10^{10} cm^{-3} ,

Os restantes parâmetros da junção são:

L= 5 μm, T = 300K , N_D(x)=Constante, N_A(x)=Constante.

Projecto 5 Modelo de Ising 2D

Considere o modelo de Ising para uma rede de NxN spins. A energia do sistema, supondo nulo o campo magnético B externo, é

$$E = -J\sum_{i,j=1}^{N} s_{i,j}\left(s_{i+1,j} + s_{i,j+1}\right)$$

onde J é a energia de interacção entre spins vizinhos. A magnetização é

$$M = \sum_{i,j=1}^{N} s_{i,j} \ .$$

A variação de energia quando se troca um único spin é

$$\Delta E = E_2 - E_1 = 2Js_{i,j}^{(1)}\left(s_{i+1,j} + s_{i-1,j} + s_{i,j+1} + s_{i,j-1}\right)$$

e a de magnetização

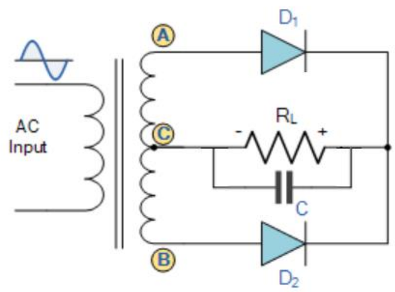
$$\Delta M = M_2 - M_1 = 2s_{i,j}^{(2)} \ .$$

Faça um programa que implemente o modelo de Ising para uma rede de NxN spins com condições fronteira periódicas, usando o método de Monte Carlo e o algoritmo de Metropolis. Considere J=1 e k_B=1.

Calcule a energia média do sistema, a magnetização, para uma rede16x16, variando a temperatura T entre 1.5 e 3 em passos de 0.1. A partir do gráfico de Magnetização determine aproximadamente a temperatura critica de transição de estado do sistema.

Projecto 6 Circuito rectificador onda completa.

Considere o seguinte circuito elétrico. Considere R=100Ω C= 100μF e que a corrente nos díodos é dada por $I_d = 10^{-14} * (e^{40v_d} - 1)\ A$.



Escreva um programa para determinar para determinar a corrente na resistência quando V_{AC}= -V_{BC}=5*sin(100π*t).

Projecto 7 Equação de Schrodinger unidimensional independente do tempo para o átomo de hidrogénio.

Considere a equação de Schrodinger unidimensional independente do tempo para um electrão no átomo de hidrogénio,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial^2}{\partial r^2}\right]\varphi(r)+V(r)\varphi(r)=E\varphi(r)$$

onde

$$V(r)=-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}.$$

Faça um programa para determinar os 3 primeiros níveis de energia do átomo de hidrogénio e respectivas funções de onda usando o algoritmo de shooting. Determine o raio de Bohr, calculando o máximo da densidade de probabilidade para o estado fundamental.

Projecto 8 Equação de Schrodinger unidimensional independente do tempo para um poço de potencial.

Considere a equação de Schrodinger (ES) unidimensional independente do tempo para uma partícula num poço de potencial *V*(z) simétrico em torno da origem (z=0),

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\varphi(z)+V(z)\varphi(z)=E\varphi(z).$$

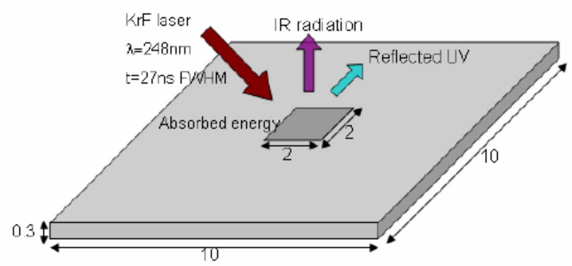
Faça um programa para determinar as soluções da ES para um poço de potencial rectangular

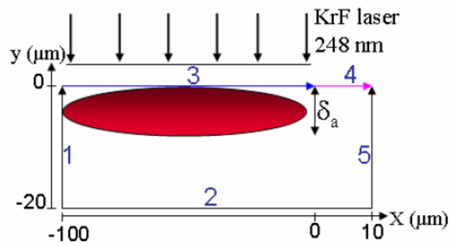
$$V(z)=\begin{cases}0 & \mathrm{-L/2<z<L/2}\\ \mathrm{V} & \mathrm{outros\ casos}\end{cases}.$$

Use o algoritmo de shooting (ou outro) e a aproximação standard para a 2ª derivada. Demonstre o funcionamento do programa calculando os primeiros valores próprios e respectivas funções onda, para várias larguras do poço (L) e alturas da barreira de potencial (V).

Projecto 9 Cristalização de substrato de silício por aquecimento laser nanosegundo.

Um feixe laser pulsado incide num substrato de silício (dimensões em mm).





A evolução da temperatura no substrato de silício é governada pela equação de condução do calor:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (-k\nabla T) = Q$$

onde T é a temperatura. ρ a densidade, Cp a capacidade calorifica especifica, k a condutividade térmica do material. Q é o termo de aquecimento volumétrico devido à absorção de radiação pelo material:

$$Q(x,y)=(1-R)*\alpha*P_{in}(t)*e^{-\alpha*y}$$

onde é R a refletividade, α o coeficiente de absorção do silício, e Pin a intensidade incidente do feixe laser, dada por:

$$P_{in}(t)= W*\sin^2(0.5*\pi*t/\tau)/\tau$$

onde W é a densidade de energia do pulso e τ a largura a meia altura do pulso laser. As condições fronteira a usar nas diferentes superfícies são:

(3,4) $\vec{n}.(k\nabla T)= \sigma.\varepsilon\left(T_{amb}^4 - T^4\right)$

(1,2, 5) $\vec{n}.\left(k\nabla T\right) = 0$

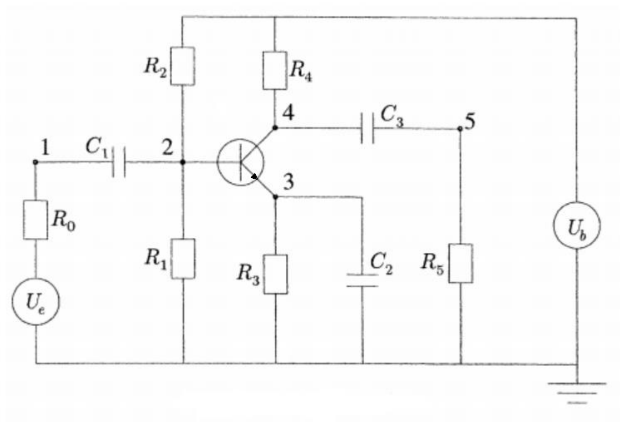
Considere os seguintes parâmetros para o Si e para o feixe laser:
R=0.61, $\alpha = 10^9/6\ m^{-1}$, ρ=2320 Kg/m^3, k=148 W/(m*K), Cp=710 J/(Kg*K), Tamb=293K, $\tau= 25*10^{-9}$ s, W=0.9 J/cm^2.

Determine a evolução temporal da temperatura no ponto (-50μm, 0) e o perfil espacial da temperatura para t=27 ns.

Projecto 10 Amplificador com transístor MOSFET.

Considere o seguinte circuito amplificador com um transístor BJT. Utilize as equações de Eber-Molls para descrever o transístor:

Ie = g(Vbe), Ic = α.g(Vbe) e g(V)=β.($e^{V/Uf}$ -1).



$U_b = 6,$	$R_0 = 1000,$				
$U_F = 0.026,$	$R_k = 9000$	for	$k = 1, \ldots, 5.$		
$\alpha = 0.99,$	$C_k = k \cdot 10^{-6}$	for	$k = 1, \ldots, 3$		
$\beta = 10^{-6},$					

Escreva um programa para determinar para determinar U_5 quando U_E=0.1*sin(200π*t).