

# Métodos Computacionais da Física A

## Prova 2

17 de maio de 2021

### 1. Tarefa 1 (5 pontos):

A distribuição de Fermi-Dirac<sup>1</sup> descreve a probabilidade de encontrar uma partícula quântica com spin semi-inteiro ( $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$ ) em um estado de energia  $E$ :

$$f_{FD} = \frac{1}{e^{(E-\mu)/kT} + 1}, \quad (1)$$

onde  $\mu$  é a chamada *energia de Fermi*,  $k$  é a constante de Boltzman e  $T$  é a temperatura. Suponha que queremos ajustar  $\mu$  de forma que a probabilidade total de encontrar uma partícula em algum estado de energia é exatamente 1, ou seja:

$$\int_{E_{min}}^{E_{max}} f_{FD} dE = 1. \quad (2)$$

Imagine um sistema quântico a uma certa temperatura (com  $kT = 1/40$  eV), onde a energia  $E$  é restrita a estar entre  $E_{min} = 0$  e  $E_{max} = 2$  eV. Qual deve ser o valor de  $\mu$  nesse caso para que a condição dada pela equação 2 seja verdadeira?

- (a) (4 pontos) Para determinar o valor de  $\mu$ , note que o lado esquerdo da equação 2 é uma função que depende de  $\mu$ , a qual você deve resolver. Utilize o método da secante (com os chutes iniciais  $a = 0.5$  e  $b = 1$ ) para determinar o zero da função e o método do trapézio (com  $N=100$ ) para a integração. Dica: como a função  $f_{FD}$  depende de  $E$  e  $\mu$ , adapte seus códigos de integração e zero de função para receber uma função com duas variáveis.
- (b) (1 ponto) Uma vez determinado o  $\mu$  que satisfaz a equação 2 para as condições descritas acima, faça um gráfico da distribuição de Fermi-Dirac  $f_{FD}(E)$  em função da energia  $E$ , para  $E$  variando de  $E_{min} = 0$  a  $E_{max} = 2$  eV. Coloque no título ou na legenda do seu gráfico o valor de  $\mu$  encontrado.

### 2. Tarefa 2 (4 pontos): Responda as seguintes perguntas:

- (a) (1 ponto) Suponha que desejamos encontrar uma raiz de uma função  $f(x)$  em um intervalo  $[a, b]$ , intervalo no qual a função  $f$  é contínua e sabemos que contém ao menos uma raiz de  $f$ . Quais as vantagens e desvantagens de usar os métodos da bissecção e de Newton para realizar essa tarefa?

---

<sup>1</sup>Vocês estudarão esse assunto em detalhes na disciplina de Mecânica Estatística. A Estatística de Fermi-Dirac é aplicada quando efeitos quânticos devem ser levados em conta e as partículas em questão são consideradas indistinguíveis. Mais especificamente, a Estatística de Fermi-Dirac se aplica a partículas chamadas férmions (partículas que obedecem ao princípio de exclusão de Pauli), como prótons e elétrons.

- (b) (1 ponto) Por que um método de integração numérica não retorna o valor exato de uma integral?
- (c) (1 ponto) Como podemos determinar o erro numérico associado ao método de Simpson?
- (d) (1 ponto) Quais as diferenças entre interpolação de dados e ajuste de função aos dados?

3. Tarefa 3 (1 ponto):

Crie um relatório em LaTeX que contenha:

- o código utilizado para resolver a Tarefa 1
- o gráfico produzido no item 1b acima.
- as respostas das perguntas da Tarefa 2

Você pode utilizar o modelo de relatório em LaTeX disponível no Moodle ou no endereço <https://www.overleaf.com/read/qpbdsqzsqvx>. Se utilizar esse modelo de relatório, coloque todos os itens pedidos acima em uma única seção chamada Resultados.

**Envie o relatório em formato PDF através do Moodle.**