

Métodos Computacionais da Física A

Prova 2

17 de maio de 2021

1. Tarefa 1 (5 pontos):

A distribuição de Fermi-Dirac¹ 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 μ é a chamada *energia de Fermi*, k é a constante de Boltzman e T é a temperatura. Suponha que queremos ajustar μ 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 $kT = 1/50$ eV), onde a energia E é restrita a estar entre $E_{min} = 0$ e $E_{max} = 2$ eV. Qual deve ser o valor de μ nesse caso para que a condição dada pela equação 2 seja verdadeira?

- (a) (4 pontos) Para determinar o valor de μ , você deve encontrar a raiz da equação 2 e para isso note que o lado esquerdo da equação 2 é uma função que depende de μ , a qual chamaremos aqui de $g(\mu)$. Para encontrar a raiz utilize o método da secante (com os chutes iniciais $a = 0.5$ e $b = 1$). Como a $g(\mu)$ envolve uma integral (μ está dentro do integrando), você precisará resolver a integral a cada vez que o método da secante chamar a função g com um valor diferente de μ . Para resolver a integral utilize o método de Simpson (com $N=100$). Dica: na integração, como o integrando f_{FD} depende tanto de E quanto de μ , adapte seu código de integração, caso necessário, para receber uma função com duas variáveis.
- (b) (1 ponto) Uma vez determinado o μ 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 e utilizando o valor de μ encontrado em (a). Coloque no título ou na legenda do seu gráfico o valor de μ encontrado.

¹Vocês 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.

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?
- (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 do trapézio?
- (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.