26/fev/2013

1o. PROGRAMA - ZEROS DE FUNÇÕES
BISSECÇÃO, NEWTON-RAPHSON, SECANTES

a) Resolva numericamente a equação

$$x^3 - \cos(x^2) = 0 \tag{1}$$

usando o método de bissecção. Use um critério de parada escolhendo ϵ adequado.
Existem outras raízes?

b) Repita o item a) com método de Newton-Raphson.

c) Vamos calcular a distância de ligação da molécula diatômica de NaBr a partir de potencial de interação dos íons Na^+ e Br^-. Assumindo que o potencial de interação é $V(r)$ quando os dois íons estão separados pela distância r, a distância de ligação r_{eq} é a de equilíbrio quando o potencial $V(r)$ é mínimo. Pode-se modelar o potencial entre os íons Na^+ e Br^- como

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + V_0 \exp(-r/r_0), \tag{2}$$

onde e é a carga do elétron, ϵ_0 é a permissividade do vácuo e V_0 e r_0 são parâmetros da ação efetiva. O primeiro termo vem da atração Coulombiana de longo alcance entre os dois íons e o segundo termo é resultado da repulsão eletrônica de curto alcance do sistema. Vamos usar $V_0 = 1.38 \times 10^3$ eV e $r_0 = 0.328$ Å, que são os parâmetros cristalinos [1].

No equilíbrio, a força entre os dois íons,

$$F(r) = -\frac{dV(r)}{dr} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} + \frac{V_0}{r_0}\exp(-r/r_0) \tag{3}$$

é zero.

i) Faça os gráficos de $V(r) \times r$ e $F(r) \times r$.

ii) Use o método de secantes e encontre o ponto de equilíbrio $r(= r_{eq})$ em Å, que é a solução de $F(r) = 0$ na região onde $V(r)$ é mínimo. Em unidades convenientes, $e^2/4\pi\epsilon_0$=14.4 eVÅ.

NOTA: O EP1 deve ser entregue na forma impressa, com os códigos fonte, as listagens em forma de tabela e os gráficos do item c).

[1] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, & 7th Ed., J. Wiley & Sons. 1996, pp.66-75.