

Métodos Computacionais em Engenharia (FIS3022)

Problemas 6

DFA-FCUP 2021-22

9 de Maio de 2022

1. Escreva um código que resolva a equação de Schrödinger dependente do tempo em 1D. Tendo em conta a necessidade de manter a unicidade, use o método de Crank-Nicholson, como visto nas aulas.
  - (a) considere como condição inicial um impulso gaussiano de momento  $k_0$ . Verifique que a propagação na ausência de potencial dá os resultados esperados. Que condições fronteira são as mais apropriadas?
  - (b) considere potenciais em degrau e em barreira. Compare os seus resultados com os resultados teóricos.
  - (c) considere o potencial do oscilador harmónico linear.
2. Implemente um código que lhe permita resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo em 2D. Use o método de ADI (visto para a equação de calor).