Mecânica Quântica Computacional

7600065

Lista 5

23/05/2025

- Sistema operacional: `Linux`
- Linguagem: `Fortran`
- Avaliação: 6 listas de exercícios (na média final serão utilizadas as 5 melhores notas, com peso 7% para cada lista) e 2 projetos (com peso 32.5% para cada projeto)
- Aulas: sexta-feira, 14:20-16:00, sala 149 + Lab. 206
- Email: attilio@ifsc.usp.br
- **Enviar as soluções por email até o dia 12 de Junho (quinta-feira) às 23:59; serão considerados somente os arquivos enviados no primeiro envio; no email e no projeto indicar claramente os exercícios não resolvidos**
- No relatório indicar claramente como os códigos foram compilados
- Para os códigos usar os nomes **LN-numerousp-ex-n**, onde N é o número da lista e n é o número do exercício. No caso de mais de um código para o mesmo exercício, usar letras a, b, c, etc. (além do número). Para os relatórios usar os nomes **LN-numerousp-relatorio**. Exemplos: **L4-12345678-ex-2b.F90**, **L4-12345678-relatorio.pdf**

A Matrix Approach

Seção 10.3 do livro *Computational Physics*, N. J. Giordano e H. Nakanishi (Pearson Education, EUA, 2006, segunda edição): a matrix approach.

Lista de exercícios:

1. Usando o power method, calcule o maior e o menor autovalor (e os correspondentes autovetores) da matriz simétrica e tridiagonal A com

$$A_{ii} = -2 \,, \qquad A_{i,i-1} = A_{i-1,i} = 1 \,.$$

   Considere os três casos descritos na aula: A^k, A^{-k} e $(\Lambda^2 I - A^2)^k$. Compare os resultados com a solução exata.

2. Considere o poço de potencial infinito para uma partícula de massa m, i.e. a equação

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi_j(x) = E_j \psi_j(x) \,. \tag{1}$$

   Sabemos que no caso de um poço no intervalo $[0, L]$ as autofunções são

$$\psi_j(x) \propto \sin\left(\frac{j\pi x}{L}\right)$$

   com autovalores para a energia

$$E_j = \frac{\hbar^2 j^2 \pi^2}{2mL^2} \,.$$

   Podemos discretizar a Eq. (1) usando

$$-2\psi_m + \psi_{m+1} + \psi_{m-1} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \delta x^2 \psi_m \,,$$

   onde $\delta x = L/(n+1)$ e devemos fixar $\phi_0 = \phi(0) = 0$ e $\phi_{n+1} = \phi(L) = 0$. A matriz no lado esquerdo é a matriz $n \times n$

$$\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

aplicada ao vetor $(\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_{n-1}, \psi_n)$. De fato, após a multiplicação, a primeira linha é $-2\psi_1 + \psi_2$, que corresponde à expressão $\psi_0 - 2\psi_1 + \psi_2$ com $\psi_0 = 0$. Também, a última linha é $\psi_{n-1} - 2\psi_n$, que corresponde à expressão $\psi_{n-1} - 2\psi_n + \psi_{n+1}$ com $\psi_{n+1} = 0$. Sabemos que para esta matriz os autovalores são $\lambda_j = -4 \sin^2 \left[\frac{j\pi}{2(n+2)}\right]$.

- Verifique analiticamente que, no limite de $n \to +\infty$, os autovalores λ_j fornecem os autoestados de energia E_j.
- Usando o power method calcule a energia do estado fundamental E_0 com precisão de 10^{-4} (compare o resultado com o valor exato).
- Faça um gráfico da autofunção normalizada e compare com a solução exata.