Mecânica Quântica Computacional

7600065

Projeto 1

11/04/2025

- 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 15 de Maio (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 **PN-numerousp-ex-n**, onde N é o número do projeto 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 **PN-numerousp-relatorio**. Exemplos: **P1-12345678-ex-2b.F90**, **P1-12345678-relatorio.pdf**

The Numerov Algorithm

Introdução ao capítulo 3 e seção 3.1 do livro *Computational Physics*, S. E. Koonin e D. C. Meredith (Addison-Wesley, EUA, 1990).

Considere a equação de Poisson para a distribuição de carga $\rho(\vec{x})$, i.e.

$$\nabla^2 \phi(\vec{x}) \, = \, - \, 4 \, \pi \, \rho(\vec{x}) \; ,$$

onde $\phi(\vec{x})$ é o potencial eletrostático.

1. Escreva a equação acima para o caso de simetria rotacional usando a definição $\phi(r) \, = \, \hat{\phi}(r)/r$. Resolva a equação diferencial para a função $\hat{\phi}(r)$ com a distribuição de carga
$$\rho(r) \, = \, \frac{e^{-r}}{8 \, \pi} \; ,$$
usando o algoritmo de Numerov. Considere dois casos, i.e. fixando os valores iniciais y_0 e y_1 para $r \approx 0$ e para r muito grande. Compare os resultados numéricos com a solução exata.

The Matching Method

Seção 10.2 do livro *Computational Physics*, N. J. Giordano e H. Nakanishi (Pearson Education, EUA, 2006, segunda edição):

Vamos considerar o potencial unidimensional de Lennard-Jones

$$V(r) \, = \, 4 \, E_0 \, \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{12} \, - \, \left(\frac{a}{r} \right)^{6} \right] \; ,$$

usado para descrever, por exemplo, a força entre dois átomos neutros.
Claramente, temos $V(r) \to +\infty$ para $r \to 0$ e $V(r) \to 0$ para $r \to +\infty$. Então, esperamos que para estados ligados ($E < 0$) a solução seja nula em $r = 0$ e em $r = +\infty$. Assim podemos usar o método de Numerov e o *matching method* para resolver a equação de Schrödinger independente do tempo:

- resolva começando de $r = 0$ (indo para frente, solução ψ_L) e de r muito grande (indo para trás, solução ψ_R), impondo solução nula e derivada não nula nos pontos iniciais;

- ajuste as derivadas para ter continuidades na solução em um r intermediário (por exemplo no mínimo do potencial r_0 onde a solução é bem diferente de zero);

- verifique se a derivada primeira é contínua no mesmo ponto; no caso, mude o valor da energia E.

2. Estude o potencial unidimensional de Lennard-Jones analiticamente para achar o mínimo do potencial r_0.

3. Use o *matching method* para obter (vários) autovalores e autofunções para a equação de Schrödinger com o potencial unidimensional de Lennard-Jones, para dois diferentes valores de E_0.

4. Compare a variação de energia entre os autovalores com a variação obtida no caso do oscilador harmônico.