

Mecânica Quântica Computacional

7600065

Lista 2

21/03/2025

- 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 10 de Abril (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: **L1-12345678-ex-2b.F90**, **L1-12345678-relatorio.pdf**

Finding roots

Achar as raízes de uma equação:

- Seção 1.3 do livro *Computational Physics*, S. E. Koonin e D. C. Meredith (Addison-Wesley, EUA, 1990);
- Seção 1.1 (incluindo as Seções 1.1.1 e 1.1.2) do livro *Métodos COMPUTACIONAIS da Física*, C. Scherer (Editora Livraria da Física, São Paulo, 2005).

Lista de exercícios:

1. Demonstrar que no método de Newton-Raphson

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

a convergência é quadrática.

2. Achar as raízes das equações $f(x) = x^2 - 5 = 0$ e $f(x) = 5x^3 - 5x - 24 = 0$ usando os métodos de Newton-Raphson e da secante para diferentes chutes iniciais e diferentes condições de convergência.

Eigenvalues of the wave equation

Autovalores da equação de onda, soluções estacionárias para a equação de Schrödinger uni-dimensional:

- Seção 3.4 do livro *Computational Physics*, S. E. Koonin e D. C. Meredith (Addison-Wesley, EUA, 1990);
- Seções 10.1, 10.2 do livro *Computational Physics*, N. J. Giordano e H. Nakanishi (Pearson Education, EUA, 2006, segunda edição).

Lista de exercícios:

1. Escreva a transformação que permitem escrever a equação de Schrödinger para os autoestados de uma partícula em um poço infinito na forma

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = -k^2 \phi(x) \quad \text{com} \quad \phi(0) = \phi(1) = 0 .$$

2. Escreva um código para calcular os primeiros três níveis de energia para o poço de potencial infinito, usando o *shooting method* e as condições de contorno $\phi(0) = 0$ e $\phi'(0) \neq 0$. Compare o resultado com a solução exata.
3. Escreva um código para calcular os primeiros três níveis de energia para o poço de potencial infinito, usando o método da secante e as condições de contorno $\phi(0) = 0$ e $\phi'(0) \neq 0$. Compare o resultado com a solução exata e com o exercício 2.