

Mecânica Quântica Computacional

7600065

Lista 6

30/05/2025

- 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**

Reduction to tri-diagonal form

Seção 5.3 do livro *Computational Physics*, S. E. Koonin e D. C. Meredith (Addison-Wesley, EUA, 1990).

Lista de exercícios:

1. Considere a matriz $n \times n$

$$A = \begin{pmatrix} -5/2 & 4/3 & -1/12 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 4/3 & -5/2 & 4/3 & -1/12 & \dots & 0 & 0 \\ -1/12 & 4/3 & -5/2 & 4/3 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -1/12 & 4/3 & -5/2 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -5/2 & 4/3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 4/3 & -5/2 \end{pmatrix}.$$

- Use o método de Householder para obter a correspondente matriz tridiagonal A_t .
- Verifique o produto $A_t = O^T A O$.
- Calcule o menor e o maior autovalor λ , e os correspondentes autovetores y_t , de A_t .
- Calcule os correspondentes autovetores y de A .
- Verifique a equação $Ay = \lambda y$ para esses autovalores.

Considere os casos $n = 10$ e 20 .