

Mecânica Quântica Computacional

7600065

Lista 3

28/03/2025

- 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**

Runge-Kutta Methods

Introdução ao capítulo 2 e seções 2.1, 2.2 e 2.3 do livro *Computational Physics*, S. E. Koonin e D. C. Meredith (Addison-Wesley, EUA, 1990).

Lista de exercícios:

1. Demonstrar que o erro da interpolação linear

$$f(x, y) = \frac{x - x_{n-1}}{h} f_n + \frac{x_n - x}{h} f_{n-1}$$

é $\mathcal{O}(h^2)$.

2. Resolva a equação

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} = -4\pi^2 y(x)$$

com as condições iniciais

$$y(x=0) = 1 \quad \text{e} \quad y'(x=0) = 0 ,$$

usando o algoritmo de Runge-Kutta.

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).

Lista de exercícios:

3. Resolva a equação

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} = -4\pi^2 y(x)$$

com as condições iniciais

$$y(x=0) = 1 \quad \text{e} \quad y'(x=0) = 0 ,$$

usando o algoritmo de Numerov. Explique como foram escolhidos os valores iniciais y_0 e y_1 . Compare o resultado com a solução obtida no exercício anterior.