Mecânica Quântica Computacional

7600065

Projeto 2

13/06/2025

- 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 6 de Julho (domingo) 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: **P2-12345678-ex-2b.F90**, **P2-12345678-relatorio.pdf**

Matrix Operations

Introdução ao capítulo 5 e seções 5.2 e 5.3 do livro *Computational Physics*, S. E. Koonin e D. C. Meredith (Addison-Wesley, EUA, 1990); seção 10.3 do livro *Computational Physics*, N. J. Giordano e H. Nakanishi (Pearson Education, EUA, 2006, segunda edição).

Projeto

1. Na lista 5, foi considerado o poço de potencial infinito no intervalo $[0, L]$, para uma partícula de massa m, ou seja, a equação

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

Para encontrar as autofunções

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

foi considerada a matriz

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

Agora, considere a matriz

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

Que tipo de soluções para o poço de potencial infinito você espera encontrar nesse caso? Motive sua resposta.

2. Usando o *power method* e a matriz (2), 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.

3. Considere o método de Householder, estudado na lista 6. Naquele caso, para os elementos fora da diagonal k_i, foi usado o sinal oposto de $a_{i-1,i}$. O que acontece quando o sinal de k_i é o mesmo de $a_{i-1,i}$? Estude o problema para a mesma matriz considerada na lista 6, ou seja

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

   Qual é a relação entre a matriz tridiagonal obtida neste caso e a matriz tridiagonal obtida na lista 6?

4. Considere novamente o problema da lista 6. Tente resolvê-lo usando a menor quantidade possível de memória. Indique, em função do tamanho n da matriz, qual é a quantidade de espaço de memória utilizado pelas variáveis (do tipo real) no programa.