FÍSICA COMPUTACIONAL I

LISTA DE EXERCÍCIOS III - DATA PARA ENTREGA: 25/03/2019

Problema 1: Calor Específico de um Sólido

A teoria de Debye para sólidos fornece a seguinte expressão para o calor específico de uma sólido a temperatura T

$$C_V = 9V\rho k_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4 \mathrm{e}^x}{(\mathrm{e}^x - 1)^2}\,\mathrm{d}x,$$

onde V é o volume do sólido, ρ é a densidade de átomos, k_B é a constante de Boltzmann e θ_D é a chamada *temperatura de Debye*, uma propriedade dos sólidos que depende da sua densidade e da velocidade do som.

a) Escreva uma função `cv(T)` que calcula C_V para um dado valor de temperatura, para uma amostra consistindo de 1000 cm^3 de alumínio sólido, que tem uma densidade $\rho = 6.022 \times 10^{28}\,\mathrm{m}^{-3}$ e uma temperatura de Debye de $\theta_D = 428\,\mathrm{K}$. Use a quadratura Gaussiana para calcular o valor da integral, com $N = 50$ pontos.

b) Use sua função para fazer um gráfico do calor específico como uma função da temperatura de $T = 5\,\mathrm{K}$ até $T = 500\,\mathrm{K}$.

Problema 2: A constante de Stefan–Boltzmann

A teoria da radiação térmica de Planck nos diz que no intervalo de frequência angular ω até $\omega + \mathrm{d}\omega$, um corpo negro com área unitária emite radiação eletromagnética com uma enérgia térmica por segundo igual a $I(\omega)\,\mathrm{d}\omega$, onde

$$I(\omega) = \frac{\hbar}{4\pi^2 c^2} \frac{\omega^3}{(\mathrm{e}^{\hbar\omega/k_B T} - 1)}.$$

Aqui $\hbar$ é a constante de Planck sobre 2π, c é a velocidade da luz e k_B é a constante de Boltzmann.

a) Mostre que a energia total irradiada por unidade de área de um corpo negro é dada por

$$W = \frac{k_B^4 T^4}{4\pi^2 c^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{x^3}{\mathrm{e}^x - 1}\,\mathrm{d}x.$$

b) Escreva um programa que calcula a integral nessa expressão. Explique qual método você usou e quão preciso é o seu método.

c) Mesmo antes de Planck introduzir sua teoria de radiação, em torno da virada do século 20, era conhecido que W é dado por pela lei de Stefan: $W = \sigma T^4$, onde σ é a constante de Stefan–Boltzmann. Utilize o valor da integral calculado no item anterior para estimar o valor da constante de Stefan–Boltzmann (em unidade SI) com três dígitos significativos. Compare seu resultado com o valor conhecido e verifique se o resultado é satisfatório.

Problema 3: Incerteza quântica no oscilador harmônico

Em um sistema onde todas as constantes valem 1, a função de onda do n-ésimo nível de energia de um oscilador harmônico quântico uni-dimensional em um poço de potencial quadrado é dada por

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \, e^{-x^2/2} \, H_n(x),$$

para $n = 0 \ldots \infty$, onde $H_n(x)$ é o n-ésimo polinômio de Hermite. Polinômios de Hermite satisfazem a uma relação de recorrência similar a dos números de Fibonacci, sendo um pouco mais complexa

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x).$$

Os primeiros 2 polinômios de Hermite são: $H_0(x) = 1$ e $H_1(x) = 2x$.

a) Escreve uma função `H(n,x)` que calcula $H_n(x)$ para um dado x e um inteiro $n \geq 0$. Use sua função para fazer um gráfico que mostra a função de onda do oscilador harmônico para $n = 0$, 1, 2 e 3, com todas as curvas no mesmo gráfico no intervalo entre $x = -4$ e $x = 4$. Dica: Existe uma função `factorial` no pacote matemático `math` que calcula o fatorial para um número inteiro.

b) Faça um gráfico separado da função de onda para $n = 30$ de $x = -10$ até $x = 10$. Dica: Se o seu programa estiver demorando muito para executar, então você deve estar realizando algum cálculo de forma errada. O programa demora somente alguns segundos para executar.

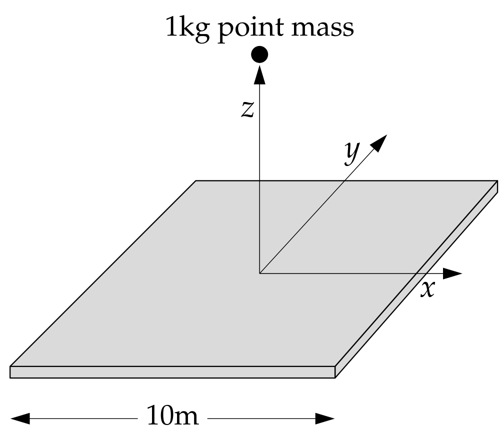
c) A incerteza quântica de uma partícula no nível quântico n pode ser quantificada pela raiz quadrada da posição média da partícula $\sqrt{\langle x^2 \rangle}$, onde

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi_n(x)|^2 \, dx.$$

Escreva um programa que calcula essa integral usando a quadratura Gaussiana com 100 pontos e então calcule a incerteza na posição da partícula para um dado valor de n. Use seu programa para calcular a incerteza para $n = 5$. Você deve obter uma resposta próxima de $\sqrt{\langle x^2 \rangle} = 2.3$.

Problema 4: Atração gravitacional de uma folha uniforme

Uma folha quadrada uniforme de metal está flutuando sem se mover no espaço:



A folha tem 10 m de lado e espessura desprezível. A sua massa é de 10 toneladas.

a) Considere a força gravitacional devido a placa sentida por um ponto de massa 1 kg, situado a uma distância z do centro do quadrado, em uma direção perpendicular a folha, como mostrado acima. Mostre que a componente da força ao longo do eixo z é

$$F_z = G\sigma z \iint_{-L/2}^{L/2} \frac{\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y}{(x^2+y^2+z^2)^{3/2}},$$

onde $G = 6.674 \times 10^{-11}\,\mathrm{m^3\,kg^{-1}\,s^{-2}}$ é constante gravitacional de Newton e σ é a massa por unidade de área da folha.

b) Escreva um programa para calcular e plotar a força em função de z de $z = 0$ até $z = 10$ m. Para a integral dupla, use (dupla) quadratura gaussiana, seguindo a Eq. (5.82), com 100 pontos de amostra ao longo de cada eixo.

c) Você deve encontrar uma curva suave, exceto para valores bem pequenos de z, onde a força deve cair repentinamente para zero. Esta queda não é um efeito real, mas um artefato do modo como foi feito o cálculo. Explique brevemente de onde vem este artefato, e sugira uma estratégia para resolvê-lo, ou pelo menos reduzir seu tamanho.

Este cálculo pode ser pensado como um modelo para a atração gravitacional de uma galáxia. A maior parte da massa em uma galáxia espiral (como a nossa própria Via Láctea) está localizada em um plano fino que passa pelo centro da galáxia, e a atração gravitacional exercida por este plano sobre corpos fora da galáxia pode ser calculada usando os métodos que empregamos aqui.