



Física Computacional

2020/2021

12 de Junho de 2021

Universidade de Aveiro

Departamento de Física

Trabalho Prático de Avaliação Contínua

No seu relatório identifique cada alínea, caso contrário a mesma poderá não ser considerada

(15 valores)

Uma partícula de massa reduzida igual a 1 está num poço de potencial a uma dimensão. A equação de Schrödinger independente do tempo é

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

Com,

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{para } x \leq 0, \\ 2x, & \text{para } x > 0. \end{cases}$$

Sabe-se que os valores das energias são dados aproximadamente por,

$$E_n^{approx} = \left[\frac{3\pi}{\sqrt{2}} \left(n - \frac{1}{4} \right) \right]^{2/3}, \quad n = 1, 2, \dots$$

- a) (5 valores) Determine o valor próprio da energia do estado fundamental e represente a sua função de onda normalizada. Use um método de Numerov e o método do 'shooting'. O valor obtido para a energia concorda com o valor esperado? Justifique.

- b) (3 valores) Repita os cálculos usando um método de Runge-Kutta de 4ª ordem. Compare os resultados obtidos, o número de iterações, e o tempo de cálculo para cada método. Considere pelo menos três valores de h com diferentes ordens de grandeza. Apresente os resultados sob a forma de tabela.
- c) (2 valores) Escreva um programa que permita calcular qualquer um dos 10 valores próprios das energias. A única interação com o utilizador deve ser através de :

```
n = input(['Escolha o valor de n\n'])
```

OBS: tenha cuidado para não usar o mesmo símbolo n para diferentes variáveis.

- d) (3 valores) Os valores exatos das energias próprias são dados por $-2^{1/3}a_n$, onde os a_n são os zeros da função de Airy do primeiro tipo. Para encontrar um zero próximo de um dado valor b , use os seguintes comandos do MATLAB :

```
syms y
zeroAi = vpasolve(airy(y) == 0, y, b);
```

Encontre o valor exato para $n=3$ e compare com a sua estimativa. Compare graficamente a sua função de onda normalizada com a função :

```
A*airy(2^(-1/3)*(2*x-Eexato));
```

- e) (2 valores) Calcule a probabilidade de encontrar a partícula numa região classicamente proibida.