Física Computacional

2021/2022

9 de junho de 2022

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

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

Com,

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

a) (6 valores) Determine o valor próprio da energia do estado fundamental (próximo de 1.8) e a respetiva função própria normalizada. Use um método de Numerov desde um valor afastado de zero (x_{max}) até zero e o método do *'shooting'*. Normalize a função e represente $|\psi(x)|^2$.

b) (3 valores) Repita os cálculos usando um método de Runge-Kutta de 4ª ordem. Integre desde um valor afastado de zero (x_{max}) até zero usando $\psi(x_{\text{max}})=0$ e um valor pequeno e negativo para $\psi'(x_{\text{max}})$. Compare o desempenho de cada método quanto ao número de iterações e o tempo de cálculo. Varie o passo e a tolerância e apresente os resultados em forma de tabela.

c) (2 valores) Sabe-se que os valores próprios são dados por $-2^{-1/3}a_n$, onde a_n são os zeros da função de Airy Ai. Faça um gráfico da função Ai para x entre -10 a 10. Identifique os intervalos onde se encontram os 3 zeros mais à direita e use um `interp1` para determiná-los.

d) (2 valores) Corra de novo o script da alínea a) para encontrar os 3 primeiros valores próprios e compare com os valores indicados na alínea c).

e) (2 valores) Sabe-se também que as funções próprias são dadas por

$$c_n \mathrm{Ai}(2^{\frac{1}{3}}(x - E_n))$$

onde c_n é uma constante de normalização. Calcule essa constante e compare as funções próprias obtidas em d) com estas soluções analíticas. Para o caso do estado fundamental, faça um gráfico do erro numérico ao longo de x para dois h diferentes. Comente.