Universidade de Aveiro
Departamento de Física

2º Teste Prático — Melhoria

Física Computacional — 2016/2017

23 de junho de 2017

Duração: 2 horas

Justifique as suas respostas às perguntas.
Note que os símbolos a **negrito** representam vetores.
Deve ser criada uma pasta no *desktop* contendo os ficheiros .m e eventuais figuras.

1. (5.5 + 3.0 + 2.5 val.) Um eletrão num poço de potencial infinito a uma dimensão está sujeito a um campo elétrico externo uniforme, de tal maneira que a energia potencial total é dada por:

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{para } x \le 0, \\ Cx & \text{para } 0 < x < L, \\ +\infty & \text{para } x \ge L, \end{cases}$$

onde C é uma constante não negativa e $L = 2$. Para este sistema, a equação de Schrödinger independente do tempo, escrita em unidades atómicas, é

$$-2\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} + Cx\,\psi(x) = E\psi(x)\,.$$

Nas zonas onde o potencial é infinito, a função de onda tem que se anular. Nas alíneas seguintes, pode usar o método de Euler–Cromer ou qualquer outro que seja adequado a soluções oscilatórias.

a) Comece por considerar o caso do poço de potencial infinito sem campo elétrico externo, ou seja, faça $C = 0$. Use o método de *shooting* para calcular a energia do primeiro estado próprio, E_1. Compare com o valor analítico, $\pi^2/(2L^2)$. Nas próximas alíneas, vamos usar como referência este valor da energia do estado fundamental do sistema sem campo elétrico exterior, que iremos representar por $E_1^{(0)}$. Represente graficamente a função própria $\psi_1(x)$.

b) Considere agora que $C = 5E_1^{(0)}/L$. Calcule os três primeiros valores próprios da energia, E_1, E_2 e E_3 e represente as respetivas funções próprias, $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ e $\psi_3(x)$. Escreva no programa ou na folha de teste os valores iniciais da energia que usou para iniciar o método de *shooting* e obter cada uma das soluções.

c) Considere a solução $\psi_1(x)$ (associada ao primeiro valor próprio E_1), obtida na alínea b). Normalize-a (multiplicando-a por um fator adequado), de maneira a obter

$$\int_0^L \psi_{1,\text{norm}}^2(x)dx = 1 \, .$$

A função

$$\psi_1^{\text{an.}}(x) = \text{Ai}\left[\left(\frac{\pi}{\delta}\right)^{2/3}\left(\delta\frac{x}{L} - \frac{E_1}{E_1^{(0)}}\right)\right] - b\,\text{Bi}\left[\left(\frac{\pi}{\delta}\right)^{2/3}\left(\delta\frac{x}{L} - \frac{E_1}{E_1^{(0)}}\right)\right] ,$$

onde $b \simeq -0.06152$ e Ai e Bi são funções de Airy, é solução analítica não normalizada da função própria em estudo. Normalize-a e represente-a em conjunto com a sua solução numérica também normalizada. Comente.

Nota: Para usar as funções de Airy $\text{Ai}(y)$ e $\text{Bi}(y)$ no MATLAB, deve escrever `airy(y)` e `airy(2,y)`, respetivamente.

2. (4.5 + 4.5 val.)

a) Calcule a transformada de Fourier discreta da função

$$f(x) = \cos(2x) + \frac{1}{2}\cos(4x) + \frac{1}{6}\cos(12x).$$

Escolha a frequência e largura de amostragem de forma a que não ocorra o efeito de aliasing e a resolução da transformada de Fourier seja de 0.1. Represente graficamente a densidade espetral.

b) No ficheiro temperatura.txt estão os dados de temperatura mensais globais da baixa atmosfera desde Dezembro de 1978 a Abril de 2013, apresentados como desvios relativamente à média. Considere que a unidade temporal é o ano, assim o espaçamento em tempo dos dados é de 1/12.

   i) Calcule e represente graficamente a transformada de Fourier discreta destes dados.
   ii) No espaço de Fourier aplique um filtro que elimine as oscilações com período inferior a 1 ano. Aplique a transformada de Fourier inversa e compare o resultado com os dados iniciais.