Universidade de Aveiro
Departamento de Física

3º Teste Prático de Avaliação Discreta

Física Computacional — 2017/2018

14 de junho de 2018

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. (3.0 + 3.0 + 3.0 val.)

a) Usando o método de Monte Carlo, calcule uma estimativa numérica do seguinte integral:

$$I_2 = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \left| \mathrm{e}^{i\theta_1} - \mathrm{e}^{i\theta_2} \right|^\beta \mathrm{d}\theta_1 \mathrm{d}\theta_2.$$

Use $\beta = 2$.

b) O integral da alínea anterior é um caso particular do integral de Dyson:

$$I_n = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_0^{2\pi} \cdots \int_0^{2\pi} \prod_{1 \le j < k \le n} \left| \mathrm{e}^{i\theta_j} - \mathrm{e}^{i\theta_k} \right|^\beta \mathrm{d}\theta_1 \cdots \mathrm{d}\theta_n.$$

Escreva um programa que permita calcular estimativas do integral de Dyson para um qualquer n.

c) Considere $n = 4$ (se não conseguiu resolver a alínea anterior, use $n = 2$). No mesmo programa, comece por iniciar a *seed* do gerador de números aleatórios com `rng(23)` e faça uma cálculo do integral usando um dado N. Apresente uma estimativa do erro. Reinicie o gerador de números aleatórios com `rng(267)`, calcule uma nova estimativa do integral, usando o mesmo N, e compare criticamente a diferença entre as duas estimativas com o erro estimado.

2. (4.5 + 2.0 + 2.5 + 2.0 val.) Uma partícula de massa reduzida igual a 1 está num poço de potencial a uma dimensão. A equação de Schrödinger independente do tempo é

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

com

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

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

$$E_n^{\text{aprox}} = \left[\frac{3\pi}{\sqrt{2}}\left(n - \frac{1}{4}\right)\right]^{2/3}, \qquad \text{com } n = 1, 2, \ldots.$$

a) Determine o valor próprio da energia do estado fundamental e represente a sua função de onda normalizada.

b) Escreva um programa que permita calcular qualquer um dos primeiros 10 valores próprios das energias. A única interação com o utilizador deve ser através de :

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

Tenha cuidado para não usar o mesmo símbolo n para diferentes variáveis.

c) 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));
```

onde A é uma constante de normalização que também tem que determinar.

d) Calcule a probabilidade de encontrar a partícula numa região classicamente proibida.