

Universidade Estadual de Campinas
Instituto de Física "Gleb Wataghin"

**Descrição Numérica da Função de Onda do Estado
Fundamental do Átomo de Positrônio Fora do Referencial
do Centro de Massa**

Relatório Final de Atividades Fapesp

Aluno: Sergio d'Almeida Sanchez
Orientador: Prof. Dr. Marco Aurélio Pinheiro Lima
Co-orientador: Márcio T do N. Varella
Agosto de 2001

ÍNDICE

1. Introdução	3
2. Parte Computacional	5
2.1 Primeira parte	5
2.2 Segunda parte	7
2.3 Terceira Parte	7
2.3 Quarta Parte	8
3. Resultados e Análise	9
4. Considerações Finais	10
5. Apêndice A: Parte Computacional Programa^{[1] e [2]}	13
5.1 Primeira Parte	13
5.2 Segunda Parte	15
5.3 Terceira Parte	16
5.4 Quarta Parte	17
6. Apêndice B: Mudanças de Variáveis	23
7. Apêndice C: Melhores Resultados	25
8. Referências	34

Relatório Final de Atividades FAPESP

1.Introdução

Este trabalho objetivava a obtenção da função de onda do átomo de positrônio fora do referencial do centro de massa. Para alcançarmos essa meta, alguns conceitos importantes foram estudados. Primeiramente, foram estudadas as séries de Fourier, a Transformada de Fourier e sua aplicação na mecânica quântica, a função Delta de Dirac, a solução rigorosa do átomo de hidrogênio e as mudanças necessárias para a solução do átomo de positrônio, a normalização da função de onda do átomo de positrônio, sua forma como somatório de ondas planas e, com entendimento da linguagem de programação FORTRAN realizar um programa de computador capaz de calcular a função de onda desejada.

Com exceção do programa propriamente dito, todos os outros tópicos já foram discutidos no relatório anterior, entregue em Fevereiro de 2001.

Em séries de Fourier e Transformada de Fourier, o relatório se concentrou basicamente na parte matemática e dos conceitos básicos para a utilização desses conceitos. Foi vista uma aplicação da transformada de Fourier na mecânica quântica na qual vimos que poderíamos encontrar a função de onda num espaço vetorial cuja base é formada pelo momento \mathbf{p} a partir da função de onda obtida num espaço vetorial cuja base é formada pela posição \mathbf{x} .

No estudo da função Delta de Dirac, novamente foi dada ênfase a conceitos matemáticos a serem utilizados mais tarde.

No estudo do átomo de hidrogênio e de positrônio foi trabalhada uma solução rigorosa do primeiro e estudou-se o que seria necessário para, a partir desta solução chegar-se a solução do átomo de positrônio.

Os estudos, então, se concentraram na função do átomo de positrônio. Nesta parte do trabalho foi feita a normalização da função de onda, onde foi encontrado:

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r} \quad (1.1)$$

e, trabalhando com a função do átomo de positrônio (desconsiderando a normalização), encontramos como ela pode ser escrita na forma de um somatório de ondas planas pois, encontramos que

$$e^{-\alpha r} \approx \frac{\alpha^3}{\pi^2} \int \frac{d^3 k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(\alpha^2 + k^2)^2} \quad (1.2)$$

onde, para o átomo de positrônio, temos que $\alpha = 0.5$ tendo, com isso,

$$e^{-r/2} \approx \frac{8}{\pi^2} \int \frac{d^3 k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(1 + 4k^2)^2} \quad (1.3)$$

Em conceitos de programação de Fortran, foram estudadas as ferramentas necessárias para a criação do programa que possa calcular a função de onda do átomo de positrônio em seu estado fundamental fora do referencial do centro de massa.

Nesta segunda parte do projeto, foi decidido que a quadratura necessária para encontrarmos a solução do problema seria a quadratura Gaussiana devido a sua grande utilização. O programa foi realizado e os resultados obtidos foram, em parte, satisfatórios. No decorrer do relatório será mostrado como foi realizado o programa na forma de comentários e o mostraremos em sua totalidade no Apêndice A. Apresentaremos, também, os resultados alcançados com a utilização do programa onde conseguimos descrever a função de onda até uma região de aproximadamente $9a_0$, como era almejado. No entanto, comentaremos por que esse resultado, infelizmente, não pôde ser aplicado.

2. Parte Computacional

O programa para o cálculo da função de onda do estado fundamental do átomo de positrônio fora do referencial do cento de massa foi realizado na linguagem computacional Fortran e se encontra em sua íntegra no apêndice A. Nesta parte será feita uma discussão do que foi feito no programa sem, para isso, utilizar-se da linguagem computacional.

Antes de comentar o programa, é importante ressaltar de que forma foi pensado e o que foi utilizado em sua realização. Utilizamos, para a realização deste programa uma sub-rotina, denominada Gauss, que nos fornece os pontos de quadratura que foram utilizados para obtenção de resultados. Tanto o vetor de onda \mathbf{k} como a coordenada relativa \mathbf{r} foram colocados como três quadraturas: uma para seu módulo (aqui representados por k ou r , respectivamente), seu ângulo polar (aqui representado por θ), e seu ângulo azimutal (aqui representado por ϕ). Para simplificar contas, comparações e tentar obter melhores resultados para as integrais em todo o espaço os módulos de \mathbf{k} e de \mathbf{r} foram divididos em duas regiões, a primeira indo de 0 até um valor a ser determinado, que denominamos de k máximo ou de r máximo, respectivamente, e a segunda de k máximo ou r máximo até infinito.

Para facilitar o entendimento do programa, esse foi dividido em 4 partes, a primeira é onde são realizadas algumas operações gerais do programa, algumas mudanças para facilitar sua realização e entendimento e algumas mudanças necessárias para a realização das contas; na segunda parte são gerados os vetores de onda, na terceira são realizadas as contas em si e na última se encontra a sub-rotina Gauss.

2.1 Primeira parte

Nesta parte são realizadas operações gerais para a construção do programa e algumas mudanças necessárias.

Primeiramente foram declaradas as variáveis globais do programa que serão utilizadas durante sua realização.

Após essa parte inicial, as variáveis necessárias para rodar o programa são lidas. Variáveis tais como:

- ? NOK(1): que representa o número de pontos de quadratura que serão utilizados para a integral que vai de 0 a k máximo.
- ? NOK(2): que representa o número de pontos de quadratura que serão utilizados para a integral que vai de k máximo até infinito
- ? XKMAX: que representa o valor de k máximo que usaremos para cálculo.
- ? NOTHT: que representa o número de pontos de quadratura que serão utilizados para o ângulo polar de **k**.
- ? NOPHI: que representa o número de pontos de quadratura que serão utilizados para o ângulo azimutal de **k**.

E de forma análoga para **r**.

Também foi preciso fazer algumas mudanças no que concerne às variáveis que serão utilizadas. Isso por que os limites de integração para essa variáveis não são de -1 até 1 como é exigido para a utilização de quadraturas gaussianas. Sendo assim, precisamos mudar os limites usuais de integração que são de 0 até 2p para **f** ; de 0 até p para **?**; de 0 à k máximo e de k máximo à infinito para **k**. Foram feitas as mesma mudanças para **r**. Todas essa mudanças são feitas de forma completa e detalhada no Apêndice B.

Ainda nesta primeira parte, foi feito um teste de convergência com a integral abaixo

$$\int_0^{\infty} \frac{k^2}{(1+4k^2)} dk \quad (2.1.1)$$

comparando-o com p/32 (que é o valor encontrado resolvendo-se analiticamente(2.1.1)) para verificar a convergência do espectro de frequências.

2.2 Segunda parte

Nesta segunda parte do programa foram gerados os vetores de onda que são utilizados para a obtenção dos resultados a partir dos pontos de quadratura da sub rotina Gauss. Esses vetores são montados da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{k} &= (k \sin \theta_k \cos \phi_k, k \sin \theta_k \sin \phi_k, k \cos \theta_k) \\ \mathbf{r} &= (r \sin \theta_r \cos \phi_r, r \sin \theta_r \sin \phi_r, r \cos \theta_r) \end{aligned} \quad (2.2.1)$$

tanto para valores positivos como para valores negativos de \mathbf{k} e somente para valores positivos de \mathbf{r} . Esta distinção de ambos os sinais para \mathbf{k} e somente o positivo para \mathbf{r} foi adotada para facilitar as contas mas não implica que a parte negativa de \mathbf{r} não é utilizada. Esta é utilizada fazendo uma modificação nas contas na hora do cálculo.

2.3 Terceira Parte

Esta parte do programa faz um cálculo da função de onda para determinados valores de \mathbf{r} e de \mathbf{k} , a partir de (1.3) e, utilizando-se dos valores de quadratura fornecidos pela sub-rotina Gauss. Desta forma, comparando com valores esperados, veríamos se o número de quadratura é bom o suficiente e se os pontos utilizados foram satisfatórios. No entanto, não foi calculada a função de onda propriamente dita por motivos a serem explicados na próxima seção.

Para sabermos, inicialmente, se os nossos cálculos estavam corretos, antes de verificar sua veracidade, testamos se a função de onda que obteríamos teria simetria esférica. Este teste foi realizado de forma muito simples. Para cada valor do módulo de \mathbf{r} , verificamos o valor da função de onda por todos os ângulos permitidos e, com isso, calculamos o desvio padrão dos nossos resultados.

Logo após deste teste, realizamos mais um, verificando se os resultados obtidos eram satisfatórios. De forma também simples, calculamos a média do valor da função de onda para todos os ângulos e então comparamos com o valor esperado, que seria dado por $e^{-r/2}$, a partir do cálculo do erro percentual dos dois valores.

2.3 Quarta Parte

Esta última parte do programa apresenta a sub-rotina Gauss. Esta sub-rotina fornece para o programa principal os pontos de quadratura para utilização nos cálculos. Esta sub-rotina é bem conhecida pelo grupo e usada com freqüência.

3. Resultados e Análise

Os resultados obtidos foram relativamente satisfatórios pois os valores encontrados conferem com os valores esperados para r pequeno com extrema precisão e exatidão, obtendo desvio padrão em torno de $7.8 \cdot 10^{-5}$ e erro percentual em torno de $1.84 \cdot 10^{-3} \%$. No entanto, quando r fica grande, embora a precisão de nossas medias permaneceu muito boa (comprovando a simetria simétrica), a exatidão de nossos resultados fica muito ruim tendo o desvio percentual alcançado valores em torno de $2.72 \cdot 10^{+90} \%$. No entanto, como nosso principal interesse era de descrever a função de onda dentro de um intervalo de $9 a 0$, a nossa exatidão se torna razoável pois, neste intervalo, obtemos erro percentual de no máximo 8.15%. Esses resultados obtidos estão apresentados no Apêndice C. Este resultado aqui apresentado foi o melhor alcançado, utilizando o menor número possível de quadratura sem prejudicar o nosso objetivo.

O problema encontrado quando r vai para infinito, ou seja, fica muito grande, ocorre devido à oscilação da onda plana na equação (1.3) que se torna muito intensa fazendo com que a aproximação da integral por quadraturas se torne altamente insatisfatória. Este foi o motivo principal da não construção da função de onda como era o nosso objetivo inicial.

4. Considerações Finais

Mesmo com esses problemas enfrentados na nossa tentativa de criar a função de onda por meio de um somatório de ondas planas, vemos que este método é válido e pode ser usado. No entanto, para conseguir a aproximação desejada, usamos um número grande de pontos de quadratura. O melhor resultado, vide Apêndice C, utilizou-se de 18 pontos de quadratura para o módulo de \mathbf{k} e \mathbf{r} , tanto de 0 à k máximo ou r máximo, quanto de k máximo ou r máximo até infinito, respectivamente, e para a parte angular de cada um, o que geraria um número absurdo de ondas planas para a inserção no método Multicanal de Schwinger com a formação do átomo de positrônio, concebido pelo aluno Márcio T do N Varella para o método multicanal de Schwinger.

Os resultados, ainda que satisfatórios não se tornaram de grande utilidade prática, como foi comentado. É provável que a quadratura usada não foi a melhor possível ou que, talvez, o método utilizado, ainda que válido, não seja computacionalmente viável. No entanto, pode-se considerar que os objetivos propostos pelo projeto foram alcançados pois me levou a uma melhor compreensão dos conceitos estudados, desde as séries de Fourier e a Transformada de Fourier, à solução do átomo de hidrogênio e de positrônio, não somente os conceitos da linguagem de programação FORTRAN mas de sua aplicabilidade e das técnicas de integração numéricas e sua vasta utilidade e aplicabilidade.

Embora este método não seja prático para a resolução deste problema específico, ele pode ser de grande valia para a resolução de outro problema.

O método multicanal de Schwinger não está obtendo bons resultados, atualmente, para o parâmetro de aniquilação. Este parâmetro é dado por:

$$Z_{eff} \gamma_{k_i} \gamma = \frac{1}{4} \int d\hat{k}_i \left\langle \gamma_{\hat{k}_i}^{(+)} \gamma_{\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; \mathbf{r}_p} \right\rangle \left\langle \gamma_{\mathbf{r}_j} \gamma_{\mathbf{r}_i} \right\rangle \gamma_{\hat{k}_i}^{(+)} \gamma_{\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; \mathbf{r}_p} \quad (4.1)$$

onde \mathbf{k}_i é o vetor de onda do pósitron incidente, $\gamma_{\mathbf{k}_i}^{(+)}$ é a função de onda de espalhamento (dependente de N elétrons e do pósitron espalhado) e onde a

equação (4.1) representa uma média sobre todas as possíveis direções de incidência.

Recentemente (de 24 à 28 de Julho), houve um congresso no qual pensou-se na suspeita de que a falha do método se deva à má descrição do cúspide na função de onda da espalhamento. Essa descrição é feita, atualmente, com Gaussianas que, por serem funções suaves, não são boas para a descrição do cúspide. Como a aniquilação ocorre quando o elétron e o pósitron estão próximos – $d(\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_e)$ – é razoável a hipótese de que a falha do método multicanal de Schwinger seja da descrição do cúspide.

O método desenvolvido neste projeto, no entanto, consegue descrever o cúspide. Para obter esta informação, utilizamos o fato de que:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{\partial}{\partial r_e} \left[\frac{\partial}{\partial r_p} \right] \right] \quad (4.2)$$

e, com isso, fixamos o valor de r_e em $1 a_0$ e encontramos dois valores de r_p (já que r é dado pelos pontos de quadratura). Com isso, foi traçado um gráfico do Valor da Função de Onda em função da Coordenada do Positrônio, esperando encontrar o cúspide em torno de $1 a_0$. O gráfico abaixo confirma o que era esperado pois, a partir dos nossos cálculos (Apêndice B) e da equação (4.2), é mostrada a presença do cúspide em torno de $1 a_0$.

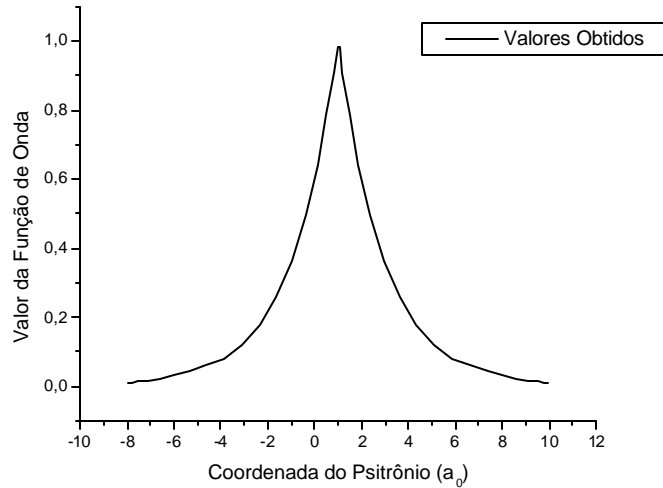


Figura 4.1: Gráfico do Valor da Função de Onda em relação a coordenada do positrônio, mostrando a presença do cuspide.

O valor fixo de r_e de em torno de $1 a_0$ foi para a realização de um teste para a presença do cuspide utilizando-se do fato de que, para o átomo de Hélio, a probabilidade máxima de aniquilação ocorre em torno de aproximadamente $0,85 a_0$ [M.T.do N. Varela, C.R.C. de Carvalho, E.P. da Silva e M. A.P. Lima, Physical Review A **63**, 052705(2001)].

Como a região de interesse é relativamente pequena (em torno de $5 a_0$), é provável que um pequeno número de ondas planas seja suficiente para descrever o cuspide nessa região resolvendo o problema do método multicanal de Schwinger em relação a aniquilação e demonstrando ter utilidade prática.

5. Apêndice A: Parte Computacional-Programa [1] e [2]

5.1 Primeira Parte

```
PROGRAM POSITRONIO
C=====
C  IMPLICIT REAL*8(A,B,D-H,O-Z),COMPLEX*16(C)
C=====
C  ESTE PROGRAMA CALCULA A FUNCAO DE ONDA ESTADO FUNDAMENTAL DO
C  POSITRONIO UTILIZANDO ONDAS PLANAS COMO FUNCOES DE BASE.
C=====
C
C      Universidade Estadual de Campinas - SP.
C      Instituto de Física
C
C  Programador: Sergio d' Almeida Sanchez
C  Orientador: Marco Aurélio Pinheiro Lima
C  Co-orientador: Macio T. do N. Varella
C=====
C  INCLUDE 'STRUC.BFN'
C  INCLUDE 'QUADR.PTS'
C=====
C  PARAMETER (NOPX=NOTHTX*NOPHIX,NOP2X=2*NOPX,NOK2X=2*NOKX)
C=====
C
C  COMMON /HELP2/THT0(NOTHTX),PHI0(NOPHIX),WW(NOTHTX),WW2(NOPHIX),
C  *NQUAD(NOTHTX,NOPHIX)
C  COMMON /HELP3/THTR(NOTHTX),PHIR(NOPHIX),WWR(NOTHTX),WW2R(NOPHIX),
C  *NQUADR(NOTHTX,NOPHIX)
C  COMMON /KKK/XX(NOKX,2),XR(NOKX,2),WW1(NOKX,2),
C  *WW1R(NOKX,2),NOK(2),NOR(2)
C  DIMENSION PLANEK(NOK2X,NOP2X,3),PLANER(NOK2X,NOP2X,3)
C  DIMENSION CRO(NOK2X,NOP2X)

PI=DACOS(-1.0D0)
END=PI/2

READ(5,*) KFLAG
READ(5,*) NOK(1),NOK(2)
READ(5,*) XKMAX
READ(5,*) NOTHT,NOPHI
READ(5,*) NOR(1),NOR(2)
READ(5,*) XRMAX
READ(5,*) NOTHTR,NOPHIR

NOP=NOPHI*NOTHT
NOP2=NOP*2
K=0
DO 300 I=1,NOPHI
DO 300 J=1,NOTHT
K=K+1
300 NQUAD(J,I)=K

NOPR=NOPHIR*NOTHTR
```

```

NOP2R=NOPR*2
K=0
DO 307 I=1,NOPHIR
DO 307 J=1,NOTHTR
K=K+1
307 NQUADR(J,I)=K

CALL GAUSS(NOTHT/2,THT0,WW,NOTHTX)
DO 310 K=1,NOTHT
THT0(K)=DACOS(-THT0(K))
310 CONTINUE
IF(NOPHI.NE.1)THEN
CALL GAUSS(NOPHI/2,PHI0,WW2,NOPHIX)
DO 320 K=1,NOPHI
PHI0(K)=END*(PHI0(K)+1.0D0)
320 WW2(K)=END*WW2(K)
ELSE
READ(5,*)PHI0(1)
WW2(1)=2.0D0*PI
END IF

CALL GAUSS(NOTHTR/2,THTR,WWR,NOTHTX)
DO 311 K=1,NOTHTR
THTR(K)=DACOS(-THTR(K))
311 CONTINUE
IF(NOPHIR.NE.1)THEN
CALL GAUSS(NOPHIR/2,PHIR,WW2R,NOPHIX)
DO 321 K=1,NOPHIR
PHIR(K)=END*(PHIR(K)+1.0D0)
321 WW2R(K)=END*WW2R(K)
ELSE
READ(5,*)PHIR(1)
WW2R(1)=2.0D0*PI
END IF

DO 200 NK=1,2
CALL GAUSS(NOK(NK)/2,XX(1,NK),WW1(1,NK),NOKX)
DO 200 IK=1,NOK(NK)
XX(IK,NK)=0.5D0*(XX(IK,NK)+1.0D0)
200 WW1(IK,NK)=0.5D0*WW1(IK,NK)

DO 201 NK=1,2
CALL GAUSS(NOR(NK)/2,XR(1,NK),WW1R(1,NK),NOKX)
DO 201 IK=1,NOR(NK)
XR(IK,NK)=0.5D0*(XR(IK,NK)+1.0D0)
201 WW1R(IK,NK)=0.5D0*WW1R(IK,NK)

DO 10 IK=1,NOK(1)
XX(IK,1)=XKMAX*XX(IK,1)
WW1(IK,1)=XKMAX*WW1(IK,1)
10 CONTINUE

DO 11 IK=1,NOR(1)
XR(IK,1)=XRMAX*XR(IK,1)
WW1R(IK,1)=XRMAX*WW1R(IK,1)
11 CONTINUE

```

```

DO 15 IK=1,NOK(2)
  WW1(IK,2)= XKMAX*WW1(IK,2)/XX(IK,2)/XX(IK,2)
  XX(IK,2)=XKMAX/XX(IK,2)
15 CONTINUE

DO 16 IK=1,NOR(2)
  WW1R(IK,2)= XRMAX*WW1R(IK,2)/XR(IK,2)/XR(IK,2)
  XR(IK,2)=XRMAX/XR(IK,2)
16 CONTINUE

RES1=0.0D0
DO 20 IK=1,NOK(1)
  ARG=4.0D0*XX(IK,1)*XX(IK,1)+1.0D0
  ARGU=XX(IK,1)*XX(IK,1)/(ARG**2)
  RES1=RES1+WW1(IK,1)*ARGU
20 CONTINUE

RES2=0.0D0
DO 30 IK=1,NOK(2)
  ARG=4.0D0*XX(IK,2)*XX(IK,2)+1.0D0
  ARGU=XX(IK,2)*XX(IK,2)/(ARG**2)
  RES2=RES2+WW1(IK,2)*ARGU
30 CONTINUE

RES = RES1 + RES2
PI32=PI/32.0D0
ERRO=DABS(PI32-RES)/(PI32)

WRITE(6,111)XKMAX,NOK(1),RES1,NOK(2),RES2,RES,ERRO

111 FORMAT(/,'KMAX='F20.10,/,',NOK(1) = ',I2,5X,',RES1 =',F20.10,/,
@'NOK(2) = ',I2,5X,',RES2 =',F20.10,/,
#'RES =',F20.10,/,',ERRO =',F20.10,/)

IF(KFLAG.EQ.0) GOTO 999

```

5.2 Segunda Parte

```

C=====
C  ESTE BLOCO GERA OS VETORES DE ONDA
C=====

IKK=0
DO 40 NK=1,2
  DO 40 IK=1,NOK(NK)
    IKK=IKK+1
    DO 40 IP=1,NOPHI
      SP=DSIN(PHI0(IP))
      XCP=DCOS(PHI0(IP))
      DO 40 IT=1,NOTHT
        ITP=NQUAD(IT,IP)
        ITPEX=ITP+NOPR
        ST=DSIN(THT0(IT))
        XCT=DCOS(THT0(IT))
        PLANEK(IKK,ITP,1)=XX(IK,NK)*ST*XCP
        PLANEK(IKK,ITP,2)=XX(IK,NK)*ST*SP

```

```

    PLANEK(IKK,ITP,3)=XX(IK,NK)*XCT
40 CONTINUE

    IKK=0
    DO 45 NK=1,2
    DO 45 IK=1,NOR(NK)
    IKK=IKK+1
    DO 45 IP=1,NOPHIR
    SP=DSIN(PHIR(IP))
    XCP=DCOS(PHIR(IP))
    DO 45 IT=1,NOTHTR
    ITP=NQUADR(IT,IP)
    ITPEX=ITP+NOPR
    ST=DSIN(THTR(IT))
    XCT=DCOS(THTR(IT))
    PLANER(IKK,ITP,1)=XR(IK,NK)*ST*XCP
    PLANER(IKK,ITP,2)=XR(IK,NK)*ST*SP
    PLANER(IKK,ITP,3)=XR(IK,NK)*XCT
    PLANER(IKK,ITPEX,1)=-XR(IK,NK)*ST*XCP
    PLANER(IKK,ITPEX,2)=-XR(IK,NK)*ST*SP
    PLANER(IKK,ITPEX,3)=-XR(IK,NK)*XCT
45 CONTINUE

```

5.3 Terceira Parte

```

C=====
C  ESTE BLOCO GERA vAlores pontuais da FUNCAO DE ONDA
C=====

```

```

    NO2K=NOK(1)+NOK(2)
    NO2R=NOR(1)+NOR(2)

```

```

    DO 65 IR=1,NO2R
    DO 65 ITPR=1,NOP2R
65 CRO(IR,ITPR)=(0.0D0,0.0D0)

```

```

    DO 50 IR=1,NO2R
    DO 50 ITPR=1,NOP2R
    IKK=0
    DO 51 NK=1,2
    DO 51 IK=1,NOK(NK)
    IKK=IKK+1
    PK2=WW1(IK,NK)*XX(IK,NK)*XX(IK,NK)
    PKW=(4.0D0*XX(IK,NK)*XX(IK,NK)+1.0D0)
    PK=PK2/(PKW**2)
    DO 51 IP=1,NOPHI
    DO 51 IT=1,NOTHT
    ITP=NQUAD(IT,IP)
    PE=0.0D0
    DO 55 IC=1,3
    PE=PE+PLANEK(IKK,ITP,IC)*PLANER(IR,ITPR,IC)
55 CONTINUE
    PRE=DCOS(PE)
    PIM=DSIN(PE)
    CE=DCMPLX(PRE,PIM)
    CCE=DCONJG(CE)

```



```

CRO(IR,ITPR)=CRO(IR,ITPR)+CE*WW(IT)*WW2(IP)*PK+
% CCE*WW(IT)*WW2(IP)*PK
51 CONTINUE
50 CONTINUE

NOOR=NO2R/2
IRR=0
DO 80 NR=1,2
DO 80 IIR=1,NOOR
S=0
SD=0
AMEAN=0
SDT=0
IRR=IRR+1
DO 70 ITPR=1,NOP2R
S=S+CRO(IIR,ITPR)
70 CONTINUE
AMEAN = S/NOP2R
DO 75 ITPR=1,NOP2R
SD = SD + (CRO(IIR,ITPR)-AMEAN)**2
SDT = (SD/NOP2R)**0.5
75 continue
print*, 'XR= ',XR(IIR,NR)
print*, 'MEDIA = ',AMEAN
print*, 'DESVIO PADRAO = ',SDT
TEXPECT = DEXP(-0.5*XR(IIR,NR))
IF (TEXPECT.NE.0.0) THEN
TERROR = DABS((TEXPECT -(8/(PI*PI))*AMEAN)*100/TEXPECT)
print*, 'VALOR ESPERADO = ', TEXPECT
print*, 'ERRO PERCENTUAL = ',TERROR
END IF

999 CONTINUE
STOP
END

```

5.4 Quarta Parte

```

C-----
SUBROUTINE GAUSS(NPQ,XX,WW,NQP)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION XX(NQP),WW(NQP)
DIMENSION X2(1),W2(1),X4(2),W4(2),
1 X6(3),W6(3),X8(4),W8(4),X10(5),W10(5),
1 X12(6),W12(6),X14(7),W14(7),X16(8),W16(8),X18(9),
1 W18(9),X20(10),W20(10),X22(11),W22(11),X24(12),W24(12),X26(13),
2 W26(13),X32(16),W32(16),
3 X48(24),W48(24)
DATA X2/0.57735026918962576450D0/
DATA W2/1.0D0/
DATA X4/0.86113631159405257522D0,0.33998104358485626480D0/
DATA W4/0.34785484513745385737D0,0.65214515486254614262D0/
DATA X6/
1 0.93246951420315202781D00,0.66120938646626451366D00,
2 0.23861918608319690863D00/
DATA W6/

```

1 0.17132449237917034504D00,0.36076157304813860756D00,
2 0.46791393457269104738D00/
DATA X8/
1 0.96028985649753623168D00,0.79666647741362673959D00,
2 0.52553240991632898581D00,0.18343464249564980493D00/
DATA W8/
1 0.10122853629037625915D00,0.22238103445337447054D00,
2 0.31370664587788728733D00,0.36268378337836198296D00/
DATA X10/
1 0.97390652851717172007D00,0.86506336668898451073D00,
2 0.67940956829902440623D00,0.43339539412924719079D00,
3 0.14887433898163121088D00/
DATA W10/
1 0.66671344308688137593D-1,0.14945134915058059314D00,
2 0.21908636251598204399D00,0.26926671930999635509D00,
3 0.29552422471475287017D00/
DATA X12/
1 0.98156063424671925069D00,0.90411725637047485667D00,
2 0.76990267419430468703D00,0.58731795428661744729D00,
3 0.36783149899818019375D00,0.12523340851146891547D00/
DATA W12/
1 0.47175336386511827194D-1,0.10693932599531843096D00,
2 0.16007832854334622633D00,0.20316742672306592174D00,
3 0.23349253653835480876D00,0.24914704581340278500D00/
DATA X14/
1 0.98628380869681233884D00,0.92843488366357351733D00,
2 0.82720131506976499318D00,0.68729290481168547014D00,
3 0.51524863635815409196D00,0.31911236892788976043D00,
4 0.10805494870734366206D00/
DATA W14/
1 0.35119460331751863031D-1,0.80158087159760209805D-1,
2 0.12151857068790318468D00,0.15720316715819353456D00,
3 0.18553839747793781374D00,0.20519846372129560396D00,
4 0.21526385346315779019D00/
DATA X16/
1 0.98940093499164993259D00,0.94457502307323257607D00,
2 0.86563120238783174388D00,0.75540440835500303389D00,
3 0.61787624440264374844D00,0.45801677765722738634D00,
4 0.28160355077925891323D00,0.95012509837637440185D-1/
DATA W16/
1 0.27152459411754094851D-1,0.62253523938647892862D-1,
2 0.95158511682492784809D-1,0.12462897125553387205D00,
3 0.14959598881657673208D00,0.16915651939500253818D00,
4 0.18260341504492358886D00,0.18945061045506849628D00/
DATA X18/
1 0.99156516842093094673D00,0.95582394957139775518D00,
2 0.89260246649755573920D00,0.80370495897252311568D00,
3 0.69168704306035320787D00,0.55977083107394753460D00,
4 0.41175116146284264603D00,0.25188622569150550958D00,
5 0.84775013041735301242D-1/
DATA W18/
1 0.21616013526483310313D-1,0.49714548894969796453D-1,
2 0.76425730254889056529D-1,0.10094204410628716556D00,
3 0.1225520671147846018D00,0.14064291467065065120D00,
4 0.15468467512626524492D00,0.16427648374583272298D00,
5 0.16914238296314359184D00/
DATA X20/
1 0.99312859918509492478D00,0.96397192727791379126D00,

2 0.91223442825132590586D00,0.83911697182221882339D00,
 3 0.74633190646015079261D00,0.63605368072651502545D00,
 4 0.51086700195082709800D00,0.37370608871541956067D00,
 5 0.22778585114164507808D00,0.76526521133497333754D -1/
 DATA W20/
 1 0.17614007139152118311D-1,0.40601429800386941331D-1,
 2 0.62672048334109063569D-1,0.83276741576704748724D-1,
 3 0.10193011981724043503D00,0.11819453196151841731D00,
 4 0.13168863844917662689D00,0.14209610931838205132D00,
 5 0.14917298647260374678D00,0.15275338713072585069D00/
 DATA X22/
 1 0.99429458548239929207D00,0.97006049783542872712D00,
 2 0.92695677218717400052D00,0.86581257772030013653D00,
 3 0.78781680597920816200D00,0.69448726318668278005D00,
 4 0.58764040350691159295D00,0.46935583798675702640D00,
 5 0.34193582089208422515D00,0.20786042668822128547D00,
 6 0.69739273319722221213D-1/
 DATA W22/
 1 0.14627995298272200684D-1,0.33774901584814154793D-1,
 2 0.52293335152683285940D-1,0.69796468424520488094D-1,
 3 0.85941606217067727414D-1,0.10041414444288096493D00,
 4 0.11293229608053921839D00,0.12325237681051242428D00,
 5 0.13117350478706237073D00,0.13654149834601517135D00,
 6 0.13925187285563199337D00/
 DATA X24/
 1 0.99518721999702136017D00,0.97472855597130949819D00,
 2 0.93827455200273275852D00,0.88641552700440103421D00,
 3 0.82000198597390292195D00,0.74012419157855436424D00,
 4 0.64809365193697556925D00,0.54542147138883953565D00,
 5 0.43379350762604513848D00,0.31504267969616337438D00,
 6 0.19111886747361630915D00,0.64056892862605626085D -1/
 DATA W24/
 1 0.12341229799987199546D-1,0.28531388628933663181D-1,
 2 0.44277438817419806168D-1,0.59298584915436780746D-1,
 3 0.73346481411080305734D-1,0.86190161531953275917D-1,
 4 0.97618652104113888269D-1,0.10744427011596563478D00,
 5 0.11550566805372560135D00,0.12167047292780339120D00,
 6 0.12583745634682829612D00,0.12793819534675215697D00/
 DATA X26/
 1 0.99588570114561692900D00,0.97838544595647099110D00,
 2 0.94715906666171425013D00,0.90263786198430707421D00,
 3 0.84544594278849801879D00,0.77638594882067885619D00,
 4 0.69642726041995726486D00,0.60669229301761806323D00,
 5 0.50844071482450571769D00,0.40305175512348630648D00,
 6 0.29200483948595689514D00,0.17685882035689018396D00,
 7 0.59230093429313207093D-1/
 DATA W26/
 1 0.10551372617343007155D-1,0.24417851092631908789D-1,
 2 0.37962383294362763950D-1,0.50975825297147811998D-1,
 3 0.63274046329574835539D-1,0.74684149765659745887D-1,
 4 0.85045894313485239210D-1,0.94213800355914148463D-1,
 5 0.10205916109442542323D00,0.10847184052857659065D00,
 6 0.11336181654631966654D00,0.11666044348529658204D00,
 7 0.11832141527926227651D00/
 DATA X32/
 1 0.99726386184948156354D0,0.98561151154526833540D0,
 2 0.96476225558750643077D0,0.93490607593773968917D0,
 3 0.89632115576605212397D0,0.84936761373256997013D0,

```

4  0.79448379596794240696D0,0.73218211874028968039D0,
5  0.66304426693021520098D0,0.58771575724076232904D0,
6  0.5068990893222939002D0,0.42135127613063534536D0,
7  0.33186860228212764978D0,0.23928736225213707454D0,
8  0.14447196158279649349D0,0.04830766568773831623D0/
DATA W32/
1  0.00701861000947009660D0,0.01627439473090567061D0,
2  0.02539206530926205945D0,0.03427386291302143310D0,
3  0.04283589802222668066D0,0.05099805926237617620D0,
4  0.05868409347853554714D0,0.06582222277636184684D0,
5  0.07234579410884850623D0,0.07819389578707030647D0,
6  0.08331192422694675522D0,0.08765209300440381114D0,
7  0.09117387869576388471D0,0.09384439908080456564D0,
8  0.09563872007927485942D0,0.09654008851472780057D0/
DATA X48/
1  0.99877100725242611860D0,0.99353017226635075755D0,
2  0.98412458372282685774D0,0.97059159254624725046D0,
3  0.95298770316043086072D0,0.93138669070655433311D0,
4  0.90587913671556967282D0,0.87657202027424788591D0,
5  0.84358826162439353071D0,0.80706620402944262708D0,
6  0.76715903251574033925D0,0.72403413092381465467D0,
7  0.67787237963266390521D0,0.62886739677651362400D0,
8  0.57722472608397270382D0,0.52316097472223303368D0,
9  0.46690290475095840454D0,0.40868648199071672992D0,
1  0.34875588629216073816D0,0.28736248735545557674D0,
2  0.22476379039468906122D0,0.16122235606889171806D0,
3  0.09700469920946269893D0,0.03238017096286936203D0/
DATA W48/
1  0.00315334605230583862D0,0.00732755390127626210D0,
2  0.01147723457923453948D0,0.01557931572294384873D0,
3  0.01961616045735552781D0,0.02357076083932437914D0,
4  0.02742650970835694820D0,0.03116722783279808890D0,
5  0.03477722256477043889D0,0.03824135106583070632D0,
6  0.04154508294346474921D0,0.04467456085669428042D0,
7  0.04761665849249047482D0,0.05035903555385447496D0,
8  0.05289018948519366710D0,0.05519950369998416287D0,
9  0.05727729210040321570D0,0.05911483969839563575D0,
1  0.06070443916589388005D0,0.06203942315989266390D0,
2  0.06311419228625402566D0,0.06392423858464818662D0,
3  0.06446616443595008221D0,0.06473769681268392250D0/
NPQH=NPQ*2+1
GO TO (2,4,6,8,10,12,14,16,18,20,22,24,26,99,99,32),NPQ
IF(NPQ.EQ.24) GO TO 48

```

```

2  CONTINUE
   DO 200 I=1,NPQ
     II=NPQH-I
     XX(II)=X2(I)
     XX(I)= -XX(II)
     WW(I)=W2(I)
200  WW(II)=W2(I)
   RETURN
4  CONTINUE
   DO 400 I=1,NPQ
     II=NPQH-I
     XX(II)=X4(I)
     XX(I)= -XX(II)
     WW(I)=W4(I)

```

```

400 WW(II)=W4(I)
   RETURN
6  CONTINUE
   DO 600 I=1, NPQ
     II=NPQH-I
     XX(II)=X6(I)
     XX(I)=-XX(II)
     WW(I)=W6(I)
600 WW(II)=W6(I)
   RETURN
8  CONTINUE
   DO 800 I=1, NPQ
     II=NPQH-I
     XX(II)=X8(I)
     XX(I)=-XX(II)
     WW(I)=W8(I)
800 WW(II)=W8(I)
   RETURN
10 CONTINUE
   DO 1000 I=1, NPQ
     II=NPQH-I
     XX(II)=X10(I)
     XX(I)=-XX(II)
     WW(I)=W10(I)
1000 WW(II)=W10(I)
   RETURN
12 CONTINUE
   DO 1200 I=1, NPQ
     II=NPQH-I
     XX(II)=X12(I)
     XX(I)=-XX(II)
     WW(I)=W12(I)
1200 WW(II)=W12(I)
   RETURN
14 CONTINUE
   DO 1400 I=1, NPQ
     II=NPQH-I
     XX(II)=X14(I)
     XX(I)=-XX(II)
     WW(I)=W14(I)
1400 WW(II)=W14(I)
   RETURN
16 CONTINUE
   DO 1600 I=1, NPQ
     II=NPQH-I
     XX(II)=X16(I)
     XX(I)=-XX(II)
     WW(I)=W16(I)
1600 WW(II)=W16(I)
   RETURN
18 CONTINUE
   DO 1800 I=1, NPQ
     II=NPQH-I
     XX(II)=X18(I)
     XX(I)=-XX(II)
     WW(I)=W18(I)
1800 WW(II)=W18(I)
   RETURN

```

```

20 CONTINUE
  DO 2000 I=1, NPQ
    II=NPQH-I
    XX(II)=X20(I)
    XX(I)=-XX(II)
    WW(I)=W20(I)
2000 WW(II)=W20(I)
    RETURN
22 CONTINUE
  DO 2200 I=1, NPQ
    II=NPQH-I
    XX(II)=X22(I)
    XX(I)=-XX(II)
    WW(I)=W22(I)
2200 WW(II)=W22(I)
    RETURN
24 CONTINUE
  DO 2400 I=1, NPQ
    II=NPQH-I
    XX(II)=X24(I)
    XX(I)=-XX(II)
    WW(I)=W24(I)
2400 WW(II)=W24(I)
    RETURN
26 CONTINUE
  DO 2600 I=1, NPQ
    II=NPQH-I
    XX(II)=X26(I)
    XX(I)=-XX(II)
    WW(I)=W26(I)
2600 WW(II)=W26(I)
    RETURN
32 CONTINUE
  DO 3200 I=1, NPQ
    II=NPQH-I
    XX(II)=X32(I)
    XX(I)=-XX(II)
    WW(I)=W32(I)
3200 WW(II)=W32(I)
    RETURN
48 CONTINUE
  DO 4800 I=1, NPQ
    II=NPQH-I
    XX(II)=X48(I)
    XX(I)=-XX(II)
    WW(I)=W48(I)
4800 WW(II)=W48(I)
    RETURN
99 WRITE(6,300)
300 FORMAT(/"??? 28 OR 30 POINT-QUADRATURE IS NOT DEFINED ??")
    END
C
C -----

```

6. Apêndice B: Mudanças de Variáveis

Nesta etapa do relatório serão descritas as mudanças de variáveis necessárias para os cálculos.

Primeiramente, foi modificada o limite de integração do ângulo polar de 0 à π para de $-\pi$ até π da seguinte forma:

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos^2 \theta \, d\theta \quad (6.1)$$

Logo após esta mudança foi realizada uma nova modificação nas variáveis, desta vez com θ mudando seu intervalo de integração de 0 à 2π para de $-\pi$ até π fazendo:

$$\int_{-\pi}^{\pi} \frac{\theta}{2} \, d\theta \quad (6.2)$$

Ambas as alterações acima foram realizadas tanto para \mathbf{k} quanto para \mathbf{r} . Somente nos resta realizar a modificação da parte modular de \mathbf{k} e \mathbf{r} . Aqui, será mostrada apenas a modificação para \mathbf{k} , pois a modificação necessária para \mathbf{r} é análoga. Será mostrada, para esta modificação, o caminho inverso saindo de $-\pi$ até π e chegando nas integrais desejadas (de 0 à k máximo e de k máximo até infinito) para um melhor entendimento. Temos:

$$\int_{-\pi}^{\pi} f(x) dx \quad (6.3)$$

Posso fazer, em primeira etapa, uma modificação de variáveis que servirá para realizar a mudança nas duas integrais. Fazendo:

$$u = \frac{(x + 1)}{2} \quad (6.4)$$

Transformando ambas as integrais, desta forma, de 0 à 1. Para transformar esta integral de 0 à 1 em uma integral de 0 até k máximo fazemos:

$$u = u' k_{\text{máximo}} \quad (6.5)$$

Para transformar, agora, a integral de 0 à 1 em uma integral de k máximo até infinito fazemos a seguinte substituição:

$$k = \frac{k_{\text{máximo}}}{u} \quad (6.6)$$

Desta forma, transformamos todas as integrais em integrais de -1 até 1 satisfazendo a condição necessária para a utilização das quadraturas Gauss. As modificações dos pesos não foram aqui mostradas pois provém de técnicas de diferenciações diretas e podem ser facilmente obtidas.

7.Apêndice C: Melhores Resultados

Abaixo encontram-se os melhores resultados alcançados com o método utilizado. Antes do resultado em si encontra-se uma legenda para se ter uma melhor noção do que se referem os valores abaixo:

- ? K máximo, NOK(1) e NOK(2) já foram comentados e, portanto, não serão aqui indicados.
- ? RES representa o resultado obtido da integral (2.1.1) realizada com os valores da quadratura utilizada.
- ? ERRO representa o erro percentual entre RES e $p/32$.
- ? XR é o valor do módulo de r da quadratura.
- ? MEDIA é a media do valor da função de onda em um dado XR em relação a todos os ângulos. Nestes valores aqui apresentados, não está aplicado o fator de normalização decorrente da Transformada de Fourier (que é $8/p^2$).
- ? DESVIO PADRÃO representa o desvio padrão das medidas da função de onda de um dado XR em todos os ângulos possíveis.
- ? VALOR ESPERADO representa o valor analítico da função de onda para cada XR (o modo que foi realizado este cálculo também já foi comentado e se encontra na seção 2.3 do relatório).
- ? ERRO PERCENTUAL é o erro percentual entre VALOR ESPERADO e a MEDIA vezes o fator de normalização decorrente da Transformada de Fourier.

KMAXIMO = 9.0000000000

NOK(1) = 26 NOK(2) = 26

RES = 0.0981747027

ERRO = 0.0000006894

XR= 3.795674210581096E-002

MEDIA = 1.21067409505408

DESVIO PADRAO = 7.821436853017322E-005

VALOR ESPERADO = 0.981200584348827
ERRO PERCENTUAL = 1.374583151421088E-002
XR= 0.198792226928710
MEDIA = 1.11666900237510
DESVIO PADRAO = 3.219411217883598E-004
VALOR ESPERADO = 0.905384002190454
ERRO PERCENTUAL = 2.719307288690659E-002
XR= 0.483288900760999
MEDIA = 0.968886572344078
DESVIOPADRAO = 6.495364684913961E-004
VALOR ESPERADO = 0.785335353604573
ERRO PERCENTUAL = 1.849018501006280E-003
XR= 0.883327684623646
MEDIA = 0.793772992501411
DESVIO PADRAO = 8.337882764508347E-004
VALOR ESPERADO = 0.642965737007127
ERRO PERCENTUAL = 6.880866520831481E-002
XR= 1.38740830622841
MEDIA = 0.616435355116345
DESVIO PADRAO = 1.279101486364714E-003
VALOR ESPERADO = 0.499721591263080
ERRO PERCENTUAL = 1.158899457405351E-002
XR= 1.98103126016724
MEDIA = 0.458548172538053
DESVIO PADRAO = 2.110994463393089E-003
VALOR ESPERADO = 0.371385144289656
ERRO PERCENTUAL = 8.077988676944441E-002
XR= 2.64711977341721
MEDIA = 0.328793991201650
DESVIO PADRAO = 2.937947978807716E-003
VALOR ESPERADO = 0.266186021223435
ERRO PERCENTUAL = 0.121850756621537

XR= 3.36651198438823
MEDIA = 0.229677908916416
DESVIO PADRAO = 3.737249875336148E-003
VALOR ESPERADO = 0.185768130677363
ERRO PERCENTUAL = 0.216275000689750
XR= 4.11851244131219
MEDIA = 0.157956733364076
DESVIO PADRAO = 3.916996812964435E-003
VALOR ESPERADO = 0.127548802787929
ERRO PERCENTUAL = 0.381111160002004
XR= 4.88148755868781
MEDIA = 0.107938660179934
DESVIO PADRAO = 5.324276026186736E-003
VALOR ESPERADO = 8.709604712411823E-002
ERRO PERCENTUAL = 0.454366610817670
XR= 5.63348801561177
MEDIA = 7.405397339033172E-002
DESVIO PADRAO = 5.701487516275180E-003
VALOR ESPERADO = 5.980033549207697E-002
ERRO PERCENTUAL = 0.377179165768511
XR= 6.35288022658279
MEDIA = 5.201888052323143E-002
DESVIO PADRAO = 6.043625066259611E-003
VALOR ESPERADO = 4.173395915827405E-002
ERRO PERCENTUAL = 1.03262959307751
XR= 7.01896873983276
MEDIA = 3.830916583486745E-002
DESVIO PADRAO = 6.949827230387900E-003
VALOR ESPERADO = 2.991233416051239E-002
ERRO PERCENTUAL = 3.81082281070340
XR= 7.61259169377159
MEDIA = 2.806452588433303E-002

DESVIO PADRAO = 7.802232097113891E-003
VALOR ESPERADO = 2.223037133569428E-002
ERRO PERCENTUAL = 2.32959001979146
XR= 8.11667231537635
MEDIA = 2.213805905757830E-002
DESVIO PADRAO = 8.194061743725159E-003
VALOR ESPERADO = 1.727774265227942E-002
ERRO PERCENTUAL = 3.85867609675908
XR= 8.51671109923900
MEDIA = 1.848379721938221E-002
DESVIO PADRAO = 8.277904593039656E-003
VALOR ESPERADO = 1.414554494109255E-002
ERRO PERCENTUAL = 5.91604467819723
XR= 8.80120777307129
MEDIA = 1.637140535648880E-002
DESVIO PADRAO = 8.487804859907076E-003
VALOR ESPERADO = 1.226992802100059E-002
ERRO PERCENTUAL = 8.15190868398816
XR= 8.96204325789419
MEDIA = 1.490153576501379E-002
DESVIO PADRAO = 8.604642282705072E-003
VALOR ESPERADO = 1.132184052419290E-002
ERRO PERCENTUAL = 6.68521525796415
XR= 2134.00822900444
MEDIA = 1.21067409505408
DESVIO PADRAO = 7.821436853017322E-005
XR= 407.460599699644
MEDIA = 1.11666900237510
DESVIO PADRAO = 3.219411217883598E-004
VALOR ESPERADO = 3.319364757930148E-089
ERRO PERCENTUAL = 2.726840424199864E+090
XR= 167.601614422461

MEDIA = 0.968886572344078
DESVIO PADRAO = 6.495364684913961E-004
VALOR ESPERADO = 4.034333988754690E-037
ERRO PERCENTUAL = 1.946665488751407E+038
XR= 91.6986995992446
MEDIA = 0.793772992501411
DESVIO PADRAO = 8.337882764508347E-004
VALOR ESPERADO = 1.224278952212271E-020
ERRO PERCENTUAL = 5.255404840423580E+021
XR= 58.3822366035806
MEDIA = 0.616435355116345
DESVIO PADRAO = 1.279101486364714E-003
VALOR ESPERADO = 2.101156499379501E-013
ERRO PERCENTUAL = 237804122968627.
XR= 40.8877949725852
MEDIA = 0.458548172538053
DESVIO PADRAO = 2.110994463393089E-003
VALOR ESPERADO = 1.322294322152755E-009
ERRO PERCENTUAL = 28109108633.3395
XR= 30.5992954355200
MEDIA = 0.328793991201650
DESVIO PADRAO = 2.937947978807716E-003
VALOR ESPERADO = 2.266978603413463E-007
ERRO PERCENTUAL = 117561826.038042
XR= 24.0605114063539
MEDIA = 0.229677908916416
DESVIO PADRAO = 3.737249875336148E-003
VALOR ESPERADO = 5.961098968619329E-006
ERRO PERCENTUAL = 3122980.18510195
XR= 19.6672952077311
MEDIA = 0.157956733364076
DESVIO PADRAO = 3.916996812964435E-003

VALOR ESPERADO = 5.361682693150973E-005

ERRO PERCENTUAL = 238696.125838171

XR= 16.5933025591432

MEDIA = 0.107938660179934

DESVIO PADRAO = 5.324276026186736E-003

VALOR ESPERADO = 2.493504354653586E-004

ERRO PERCENTUAL = 34987.8803633560

XR= 14.3783034197515

MEDIA = 7.405397339033172E-002

DESVIO PADRAO = 5.701487516275180E-003

VALOR ESPERADO = 7.547290782437884E-004

ERRO PERCENTUAL = 7853.30293067409

XR= 12.7501223242123

MEDIA = 5.201888052323143E-002

DESVIO PADRAO = 6.043625066259611E-003

VALOR ESPERADO = 1.703515602014193E-003

ERRO PERCENTUAL = 2375.17054267367

XR= 11.5401568239396

MEDIA = 3.830916583486745E-002

DESVIO PADRAO = 6.949827230387900E-003

VALOR ESPERADO = 3.119512897423533E-003

ERRO PERCENTUAL = 895.419516923994

XR= 10.6402659249769

MEDIA = 2.806452588433303E-002

DESVIO PADRAO = 7.802232097113891E-003

VALOR ESPERADO = 4.892103215776443E-003

ERRO PERCENTUAL = 364.999343724655

XR= 9.97945917399576

MEDIA = 2.213805905757830E-002

DESVIO PADRAO = 8.194061743725159E-003

VALOR ESPERADO = 6.807505081245683E-003

ERRO PERCENTUAL = 163.597816878587

XR= 9.51071359074721
MEDIA = 1.848379721938221E-002
DESVIO PADRAO = 8.277904593039656E-003
VALOR ESPERADO = 8.605473752237814E-003
ERRO PERCENTUAL = 74.1031595835843
XR= 9.20328233220815
MEDIA = 1.637140535648880E-002
DESVIO PADRAO = 8.487804859907076E-003
VALOR ESPERADO = 1.003535254206214E-002
ERRO PERCENTUAL = 32.2341322165129
XR= 9.03811749944985
MEDIA = 1.490153576501379E-002
DESVIO PADRAO = 8.604642282705072E-003
VALOR ESPERADO = 1.089927779016812E-002
ERRO PERCENTUAL = 10.8213788742446

Abaixo, encontram-se quatro gráficos para uma melhor visualização dos resultados obtidos. Em dois desses, foram traçados o Valor da Função de Onda em função da coordenada relativa; um envolvendo todos os pontos (com a exceção de um ponto que, devido ao fato de que seu XR ser muito grande em relação aos outros, $XR=2134.00822900444$, prejudicava a visualização do gráfico) e outro na região que vai até $9 a_0$ (como era o objetivo inicial), para se ter uma melhor idéia do nível de veracidade dos dados obtidos. Nos outros dois gráficos foram traçados a Densidade de Probabilidade da Função de Onda em função da coordenada relativa envolvendo os mesmos intervalos previamente citados. Pode-se perceber claramente que os pontos calculados estão de extremo acordo com os valores analíticos até $9 a_0$ e que, conforme XR se torna muito grande há uma enorme discrepância entre os valores obtidos e os valores analíticos.

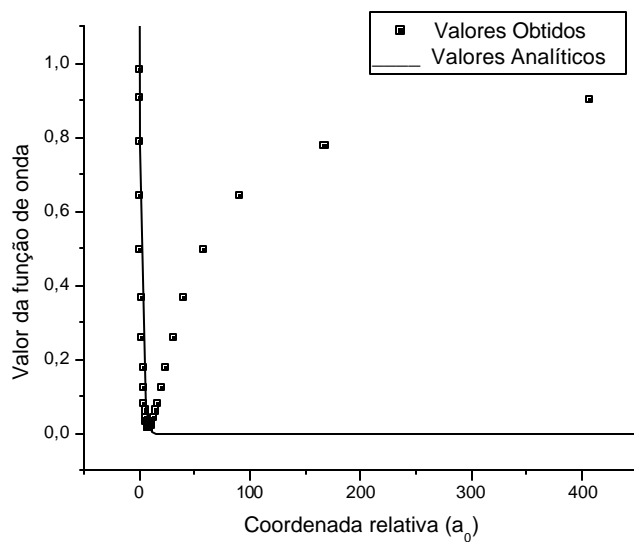


Figura C.1: Gráfico do Valor da Função de Onda em função da Coordenada Relativa envolvendo todos os pontos com uma única exceção (em que $XR=2134.00822900444$)

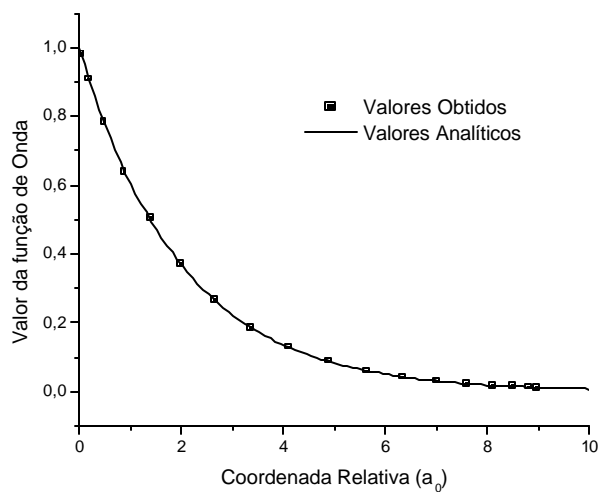


Figura C.2: Gráfico do Valor da Função de Onda em função da Coordenada Relativa numa região de até $9 a_0$

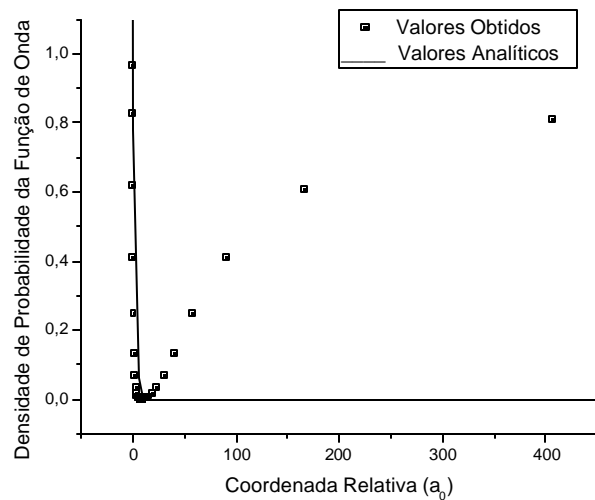


Figura C.3: Gráfico da Densidade de Probabilidade da Função de Onda em Função da Coordenada Relativa em todos os pontos com a exceção de um (no qual $XR=2134.00822900444$).

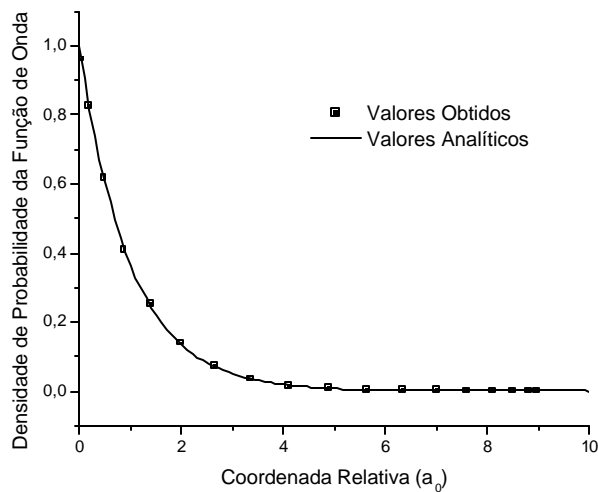


Figura C.4: Gráfico da Densidade de Probabilidade da Função de Onda em função da Coordenada Relativa numa região até $9 a_0$

8. Referências

[1] Helh, M. E., “Linguagem de Programação Estruturada FORTRAN 77”, editora McGraw-Hill, 1987.

[2] Press, W.H., Flannery, B.P., Teukolsky, S.A. e Vetterling, W.T., “Numerical Recipes, the Art of Scientific Computing”, editora Cambridge University Press, 1986.