

UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE



INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS

Método de Numerov para o Potencial Central

Aluno:
Davidson de Faria

Professor:
Rodrigo G. Amorim

16 de julho de 2018

Sumário

1	Introdução e Objetivo	3
2	Metodologia	4
2.1	Átomo de Hidrogênio	4
2.2	Método de Numerov para o Potencial Central	6
3	Resultados e Discussão	7
4	Conclusão	8

Lista de Figuras

1	Potencial efetivo.	6
2	Solução radial para diferentes n e l	7

Lista de Tabelas

1	Níveis de energia.	7
---	----------------------------	---

Resumo

Neste trabalho, será apresentado o método de Numerov para solucionar equações diferenciais de segunda ordem. O método será aplicado ao potencial central coulombiano para encontrar os níveis de energia e a solução radial do átomo de hidrogênio e comparar os resultados obtidos numericamente com as soluções analíticas já conhecidas em mecânica quântica.

1 Introdução e Objetivo

Os potenciais centrais são assim chamados pelo fato de apresentarem simetria quando expressos em coordenadas esféricas e dependem apenas da variável radial r respeitando a relação $V(\vec{r}) = V(r)$. Consequentemente, em mecânica quântica, o potencial central comuta com os operadores de momento angular L^2 e L_z , pois os mesmos somente atuam sobre as coordenadas esféricas θ e φ . A energia cinética também comuta com esses operadores, permitindo escrever o operador hamiltoniano de forma a explorar a conservação do momento angular para obter o espectro de energia.

Neste trabalho, mostraremos a solução analítica da equação de radial da equação de Schrödinger, obtida por $H\psi(r) = E\psi(r)$, e que a energia do átomo de hidrogênio diminuiu de acordo com o número quântico n . Mostraremos também, a aplicação método de Numerov, calculando as energias para diferentes n e suas degenerescências para diferentes l .

O objetivo deste trabalho é aplicar o método de Numerov para a solução de equações diferenciais e encontrar o espectro de energia e as soluções radiais do átomo de hidrogênio.

2 Metodologia

Nesta seção, apresentaremos os métodos usados para a análise do potencial coulombiano para estudo do átomo de hidrogênio.

2.1 Átomo de Hidrogênio

O caso mais importante do estudo dos potenciais centrais, é do átomo de Hidrogênio, utilizando do potencial coulombiano e da equação de Schrödinger para encontrar os níveis de energia e sua função de onda.

A equação de Schrödinger independente do tempo para uma partícula de massa m sob a ação de um potencial coulombiano pode ser escrita como

$$H\psi(\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (1)$$

onde o laplaciano em coordenadas esféricas tem a forma

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (2)$$

Assim, podemos escrever o hamiltoniano como

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r), \quad (3)$$

onde o quadrado do operador momento angular é

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (4)$$

Devido à relação de comutação do hamiltoniano com o operador L^2 e uma componente de L_z , é comum escrever

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (5)$$

formando um conjunto completo e possuindo autofunções em comum para os três observáveis.

A aplicação do hamiltoniano em $H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$ sugere a independência da variável radial em relação às angulares, permitindo escrever a solução como

$$\psi(\vec{r}) = \psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi). \quad (6)$$

A solução da parte angular é conhecida como Harmônicos Esféricos de forma que

$$\begin{cases} L_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \varphi), \\ L^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta, \varphi), \end{cases} \quad (7)$$

onde l é o número quântico orbital e m é o número quântico magnético. Enquanto que a equação radial tem a forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R_{nl}}{\partial r} \right) + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R_{nl}(r) = E_{nl} R_{nl}(r), \quad (8)$$

onde n é o número quântico principal.

Para simplificar, faremos a substituição $R_{nl}(r) = \frac{1}{r} u_{nl}(r)$ e multiplicaremos toda a equação (8) por r , assim a equação de radial ganha a forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u_{nl}}{\partial r^2} + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) - E_{nl} \right] u_{nl}(r) = 0, \quad (9)$$

onde chamaremos de potencial efetivo $V_{ef} = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$.

Como o potencial coulombiano tem a forma

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (10)$$

onde e é a carga do elétron, Z é o número atômico e ϵ_0 é a permissividade do vácuo, utilizaremos as unidades atômicas para escrever os níveis de energia. O comprimento é escrito em termos do raio de Bohr a_0 ,

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e q_e^2} = 0.529177 \cdot 10^{-10} m, \quad (11)$$

e a energia é escrita em termos de Rydberg (Ry)

$$1Ry = \frac{m_e q_e^4}{2\hbar^2} = 13.6058 eV, \quad (12)$$

onde $q_e^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$.

A figura (1) apresenta a forma do potencial efetivo para diferentes l .

A solução para a equação radial tem a forma

$$u_{nl} = r^{l+1} e^{-\frac{r}{\hbar} \sqrt{-2m_e E}} \sum_{n=0}^{\infty} A_n r^n, \quad (13)$$

e os níveis de energia são

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{m_e q_e^4}{2\hbar^2} = -\frac{Z^2}{n^2} Ry. \quad (14)$$

Como $n \geq l+1$, podemos encontrar soluções para $n = l+1, l+2, l+3 \dots$ para valores de $l = 0, 1, 2, 3 \dots$. Assim, um nível de energia possui uma degenerescência $(2l+1)$.

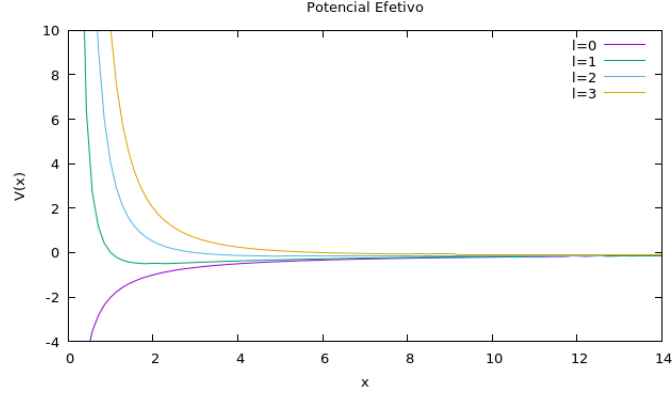


Figura 1: Potencial efetivo.

2.2 Método de Numerov para o Potencial Central

Em física, equações diferenciais aparecem frequentemente para descrever os fenômenos matematicamente. O método de Numerov aproxima uma solução integrando essas equações. De forma geral, uma equação diferencial pode ser escrita como

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} = s(x) - g(x)y(x). \quad (15)$$

A partir dessa equação geral, é possível obter a fórmula de Numerov, onde

$$\begin{aligned} y(x + \Delta x) \left[1 + \frac{(\Delta x)^2}{12} g(x + \Delta x) \right] &= 2y(x) \left[1 - \frac{5(\Delta x)^2}{12} g(x) \right] \\ &- y(x - \Delta x) \left[1 + \frac{(\Delta x)^2}{12} g(x + \Delta x) \right] + \frac{(\Delta x)^2}{12} [s(x + \Delta x) \\ &+ 10s(x) + s(x - \Delta x)] + O[(\Delta x)^6]. \end{aligned} \quad (16)$$

Resolvendo a fórmula de Numerov para um passo futuro, obtemos

$$y_{i+1} = \frac{(12 - 10f_i)y_i - f_{i-1}y_{i-1}}{f_{i+1}} \quad \text{e} \quad x = i\Delta x, \quad (17)$$

onde $f(x) = 1 + \frac{(\Delta x)^2}{12} g(x)$.

Para aplicar o método de Numerov na equação radial (9), é necessário contornar a singularidade em $r = 0$, trabalhando com uma grade de passo variável tornando grade mais densa próximo à origem.

Para construir uma grade de pontos logarítmicos, fazemos uma substituição de variável $x = x(r)$, de forma que

$$x(r) = \log \frac{Zr}{a_0}, \quad (18)$$

onde x é adimensional, desde que $\Delta x = \frac{\Delta r}{r}$.

Assim, aplicando o método de Numerov na equação radial, identificamos $y(x) = \frac{1}{\sqrt{r}}u(r)$, $s(x) = 0$ e $g(x) = \frac{2m_e}{\hbar^2}r^2(E - V(r(x)) - (l + 0.5)^2)$, onde $V(r)$ é o potencial coulombiano.

3 Resultados e Discussão

A partir da implementação descrita na seção anterior, obtivemos as energias pelo método de Numerov para o átomo de hidrogênio utilizando $Z = 1$. As energias estão descritas na tabela (1).

Tabela 1: Níveis de energia.

n	E_n	Analítico (Ry)	Numerov (Ry)
1	E_1	-1.00	-1.000000
2	E_2	-0.25	-0.250000
3	E_3	-0.11	-0.111111

As funções radiais para $n = 1, 2, 3$ e seus possíveis $l = n - 1$ são apresentadas na figura (2).

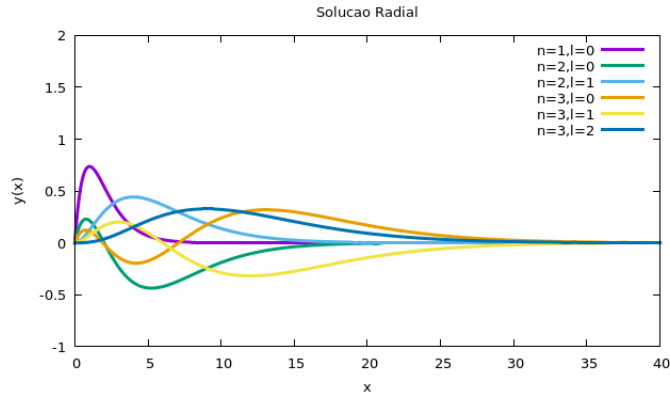


Figura 2: Solução radial para diferentes n e l .

4 Conclusão

Neste trabalho, o método de Numerov foi aplicado ao problema do potencial central para simular o átomo de hidrogênio e encontrar suas soluções numéricas e compará-las com as teóricas. Os resultados obtidos pelo método de Numerov coincidem com os teóricos, mesmo aproximando a expansão feita para chegar na fórmula (16). Os valores de energia encontrados foram muito precisos para os estados propostos. Embora tenha sido aplicado apenas para 3 estados diferentes, o método de Numerov mostrou eficiência no cálculo das soluções radiais, mostrando a degenerescência $(2l + 1)$ na energia.

Referências

aaaa.

- EISBERG, R.; RESNICK, R. Física Quântica. 9ed.
- GIANNOZZI, P. Numerical Methods in Quantum Mechancs. 3ed.
- CARUSO, F.; OGURI, V. O método numérico de numerov aplicado à equação de schrödinger. Revista Brasileira da Ensino de Física, scielo, v.36.