

UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE



INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS

Método de Numerov para o Oscilador Harmônico Quântico

Aluno:
Davidson de Faria

Professor:
Rodrigo G. Amorim

16 de julho de 2018

Sumário

1	Introdução e Objetivo	3
2	Metodologia	4
2.1	Potencial Harmônico Unidimensional	4
2.2	Hamiltoniano do Oscilador Harmônico	4
2.3	Discussão	7
3	Método de Numerov	12
4	Implementação Numérica	13
4.1	Critério de Matching	18
5	Resultados e Discussão	19
6	Conclusão	22

Lista de Figuras

1	Potencial harmônico	4
2	O potencial, as funções de onda e os limites clássicos de cada estado.	7
3	Estado Fundamental: $n = 0$	9
4	Estado Excitado: $n = 1$	9
5	Estado Excitado: $n = 2$	10
6	Estado Excitado: $n = 3$	10
7	Estado Excitado: $n = 41$	11
8	Estado Excitado: $n = 42$	11
9	Estado Fundamental: $n = 0$	19
10	Estado Excitado: $n = 1$	20
11	Estado Excitado: $n = 2$	20
12	Estado Excitado: $n = 3$	20
13	Estado Excitado: $n = 41$	21
14	Estado Excitado: $n = 42$	21

Lista de Tabelas

1	Os primeiros polinômios de Hermite e Autofunções	7
2	Níveis de energia do oscilador harmônico	19
3	Limites clássicos	22

Resumo

Neste trabalho, será apresentado o método de Numerov que visa solucionar equações diferenciais de segunda ordem. O método será desenvolvido e aplicado ao oscilador harmônico para comparar os resultados obtidos numericamente com as soluções analíticas já conhecidas em mecânica quântica.

1 Introdução e Objetivo

O oscilador harmônico é um problema canônico da física já solucionado de diversas formas e, portanto, seus resultados são bem consolidados. Seu movimento é descrito por uma equação diferencial de segunda ordem e o potencial deve ter um mínimo para que haja um equilíbrio estável. Em mecânica quântica, a energia de um oscilador harmônico é quantizada e a equação de Schrödinger prevê que, devido ao princípio da incerteza, há um valor mínimo. Dessa forma, é demonstrado que as oscilações ocorrem somente quando os valores de energia superam os de potencial e caso contrário, o movimento tende à evanescer.

Este trabalho abordará a solução analítica do oscilador harmônico, onde será feita substituições na equação de Schrödinger para obter a equação diferencial de Hermite, de forma que possível aplicar o método de série de potências. A solução encontrada é dependente do polinômio de Hermite $H_n(x) = (-1)^n e^{\frac{x^2}{2}} \frac{d^n}{dx^n} e^{-\frac{x^2}{2}}$, e a energia apresenta valores discretos $E_n = (n + 0.5)\hbar\omega$. Também abordará o método de Numerov, demonstrando sua fórmula e a implementação para a solução numérica da equação de Schrödinger.

O objetivo deste trabalho é apresentar o método de Numerov para a solução de equações diferenciais e verificar sua eficiência na aplicação ao oscilador harmônico comparando com os resultados teóricos.

2 Metodologia

O oscilador harmônico simples tem grande importância na física pela sua capacidade de descrever qualquer sistema que apresente oscilações em torno de um equilíbrio, como um sistema massa-mola, pêndulo, vibrações em moléculas diatônicas, vibrações do núcleo de um cristal ou o movimento de múons. Neste capítulo, o oscilador harmônico quântico será desenvolvido analiticamente e será apresentado o potencial para o oscilador anarmônico.

2.1 Potencial Harmônico Unidimensional

Para apresentar oscilações, uma partícula necessita de um potencial que tenha um ponto mínimo. A forma mais simples de um potencial sobre uma partícula de massa m , e que se mova em uma dimensão (x) pode se escrita como

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2, \quad (1)$$

onde k é a constante da força real e positiva. Desse modo, a partícula é atraída por uma força restauradora, $F_x = -kx$, para o equilíbrio ($x = 0$) e oscila com frequência angular

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (2)$$

Na figura (1), a forma do potencial da equação (1) é apresentada.

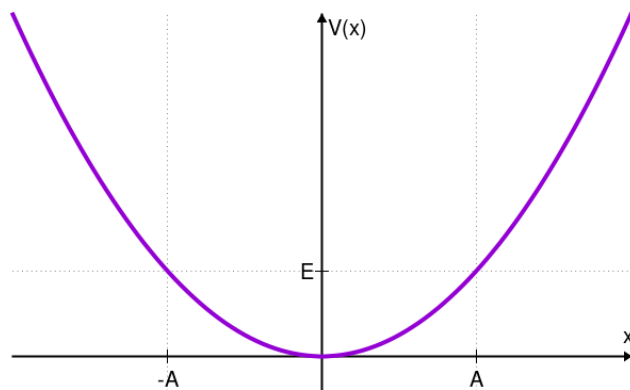


Figura 1: Potencial harmônico

2.2 Hamiltoniano do Oscilador Harmônico

A segunda lei de Newton mostra que o movimento de uma partícula é regido por $\vec{F} = m\vec{a}$, portanto, a equação de movimento de uma partícula com

potencial $V(x)$ descrito pela equação (1) é

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -kx, \quad (3)$$

e tem solução $x = A \cos(\omega t - \varphi)$, onde A é a amplitude do movimento, ω a frequência angular e φ a fase, que são determinados por condições iniciais.

A energia total pode ser escrita como a soma das energias cinética, $T = \frac{1}{2}m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2$, e potencial, $V = \frac{1}{2}kx^2$, logo

$$E = T + V = \frac{1}{2}m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2}kx^2. \quad (4)$$

Em um sistema conservativo a energia independe do tempo, pois a substituição da solução da equação de movimento resulta em $E = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2$. Logo, o Hamiltoniano clássico é a energia total,

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad (5)$$

onde $p = m \frac{dx}{dt}$ e $\omega = \sqrt{k/m}$.

A partir da energia total, é possível determinar a probabilidade de encontrar uma partícula em um ponto x . O valor máximo em que x pode receber ocorre quando a energia cinética é mínima e a potencial máxima. Assim, da equação (4), é obtido que

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2 x_{max}^2 \Rightarrow x_{max} = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}. \quad (6)$$

A densidade de probabilidade, $\rho(x)dx$, de encontrar a partícula entre x e $x+dx$ é

$$\rho(x)dx = \frac{dt}{T}, \quad (7)$$

onde $dt = |dx/\dot{x}|$ é a variação temporal e $T = \pi/\omega$ é o período de oscilação. Como $\dot{x} = \pm \omega \sqrt{x_{max}^2 - x^2}$ ¹, então a densidade de probabilidade clássica é

$$\begin{aligned} \rho(x)dx &= \frac{dx}{\pi \sqrt{x_{max}^2 - x^2}}, & \text{se } |x| < x_{max}; \\ \rho(x)dx &= 0, & \text{se } |x| > x_{max}. \end{aligned} \quad (8)$$

Em mecânica quântica, o oscilador harmônico é descrito pela equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (9)$$

¹Resolvendo a equação (4) para \dot{x} substituindo x_{max} .

cujos potencial, $V(x)$, é dado pela equação (1).

Substituindo o potencial (1) e a frequência angular (2), a equação pode ser reescrita como

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^2 x^2 \right] \psi = 0. \quad (10)$$

Introduzindo uma de variável de modo que a nova variável fique adimensional $u = \sqrt{m\omega/\hbar}x$, as derivadas de $\psi(x)$ se tornam

$$\frac{d\psi}{dx} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{d\psi}{du}, \quad (11) \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2\psi}{du^2}, \quad (12)$$

portanto, a equação (10) fica

$$\frac{d^2\psi}{du^2} + \left[\frac{2E}{\hbar\omega} - u^2 \right] \psi = 0. \quad (13)$$

Para resolver essa equação e encontrar os possíveis valores da energia, a solução e sua primeira derivada devem ser unívocas, contínuas e finitas para $u \rightarrow \infty$ e $u \rightarrow -\infty$. Portanto, para esses valores, qualquer valor de energia se torna desprezível se comparado com u^2 , e a equação se torna

$$\frac{d^2\psi}{du^2} = u^2\psi, \quad (14)$$

com solução $\psi(u) = Ae^{-u^2/2} + Be^{u^2/2}$.

Na condição de $|u| \rightarrow \infty$, o termo $Be^{u^2/2}$ diverge contradizendo a condição de que $\psi(u)$ seja finita. Assim, considerando a constante $B = 0$, as autofunções para u grande devem ser

$$\psi(u) = Ae^{-u^2/2}. \quad (15)$$

Dessa forma, a solução se torna fisicamente aceitável e tem forma assintótica.

Porém, a equação de Schrödinger (13) não pode ser diretamente resolvida pelo método de séries de potências. Portanto, é necessário escrever a solução acima introduzindo uma função $H(u)$, que varie pouco em relação à $e^{-u^2/2}$ e que satisfaça todas as condições de $\psi(u)$, assim a função de onda pode ser escrita como

$$\psi(u) = AH(u)e^{-u^2/2}. \quad (16)$$

O desenvolvimento do método de série de potências propõem que a solução para $H(u)$ seja o polinômio de Hermite, de forma que a solução da equação de Schrödinger seja

$$\psi(u) = AH(u)e^{-u^2/2} = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(u), \quad (17)$$

onde as autofunções $\psi_n(u)$ correspondem à

$$\psi_n = A_n H_n(u) e^{-u^2/2}, \quad (18)$$

Tabela 1: Os primeiros polinômios de Hermite e Autofunções

Ordem n	Polinômios de Hermite $H_n(u)$	Autofunções $\psi_n(u)$
0	$H_0 = 1$	$\psi_0(u) = A_0 e^{u^2/2}$
1	$H_1 = 2u$	$\psi_1(u) = A_1 2u e^{u^2/2}$
2	$H_2 = 4u^2 - 2$	$\psi_2(u) = A_2 (4u^2 - 2) e^{u^2/2}$
3	$H_3 = 8u^3 - 12u$	$\psi_3(u) = A_3 (8u^3 - 12u) e^{u^2/2}$

e as constantes A_n são determinadas pela normalização da função. Na tabela (1), encontra-se os polinômios de Hermite para os quatro primeiros estados de energia.

A paridade das autofunções depende diretamente de n , pois, se n é par, $H_n(-u) = H_n(u)$ é par e se n é ímpar, $H_n(-u) = -H_n(u)$ é ímpar. Como $e^{u^2/2}$ é par, então $\psi_n(u)$ tem a mesma paridade de $H_n(u)$. Isso é uma consequência da simetria do potencial, onde $V(-x) = V(x)$.

2.3 Discussão

A seção anterior mostrou o desenvolvimento da equação de Schrödinger para um potencial harmônico até encontrar suas autofunções e mostrar que a energia é discretizada, como mostra a figura (2).

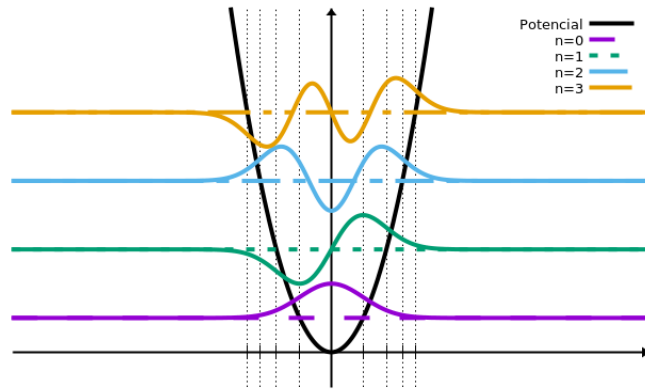


Figura 2: O potencial, as funções de onda e os limites clássicos de cada estado.

Classicamente, o estado mais baixo de energia está associado ao repouso da partícula, ou seja, potencial é zero. Porém, quanticamente, a energia só pode assumir valores discretos e dependentes de n , como mostra a equação

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (19)$$

Consequentemente, o estado fundamental tem uma energia mínima, $E_0 = 0.5\hbar\omega$, devido ao princípio da incerteza de Heisenberg, que diz que o produto entre as incertezas da posição e do momento linear é sempre maior do que $\hbar/2$. Como a energia é quantizada pela equação (19), então seus níveis são equidistantes, desde que,

$$E_{n+1} - E_n = \Delta E = \hbar\omega. \quad (20)$$

Um efeito quântico, é a possibilidade de encontrar partículas mesmo em regiões em que $V(x) > E$, enquanto que classicamente, esse efeito não existe. A densidade de probabilidade, $P(x)dx$, que pode ser obtida a partir do quadrado da função de onda,

$$P(x)dx = |\psi(x)|^2 dx. \quad (21)$$

Conforme n aumenta, a região classicamente aceita também aumenta. Isso é uma consequência direta da equação (8), em que fazendo a substituição de x_{max} com a energia discreta, é possível obter

$$\rho(x)dx = \frac{dx}{\pi\sqrt{2(n+1/2) - x^2}}. \quad (22)$$

Resolvendo o termo dentro da raiz, é possível encontrar os valores que x pode assumir,

$$-\sqrt{2n+1} < x < \sqrt{2n+1}. \quad (23)$$

As figuras (3) até (8) mostram o comportamento das funções de onda e densidade de probabilidades para cada estado n e foram obtidas a partir das autofunções (18), utilizando os polinômios de Hermite da tabela (1). As funções de onda e as densidades de probabilidade estão normalizadas de acordo com o maior valor, portanto, os picos estarão sempre em 1.

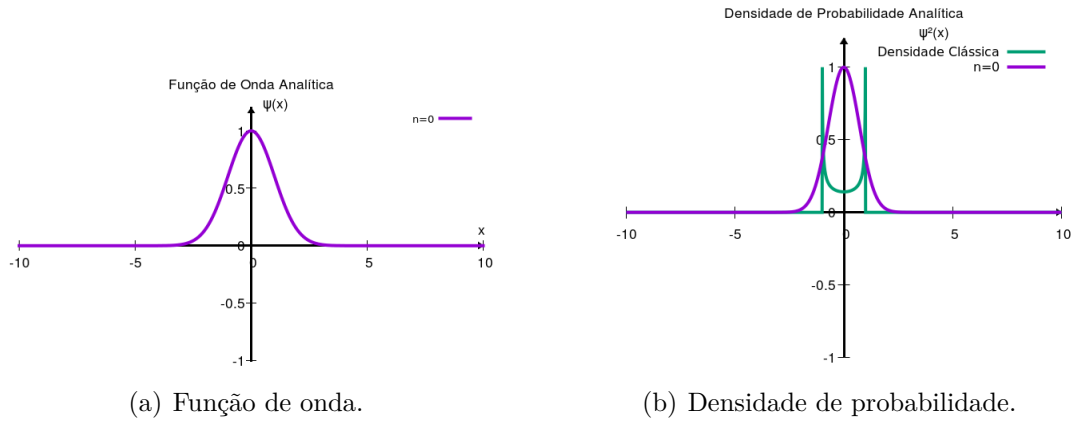


Figura 3: Estado Fundamental: $n = 0$.

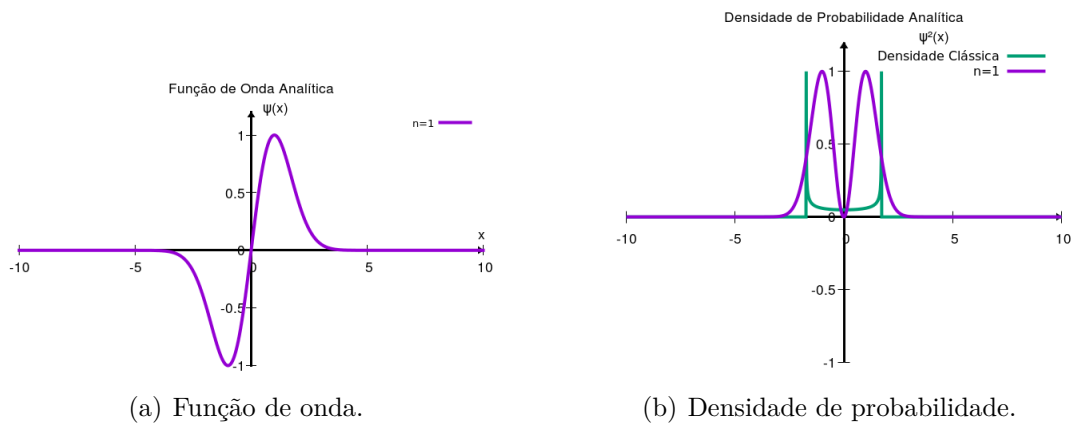
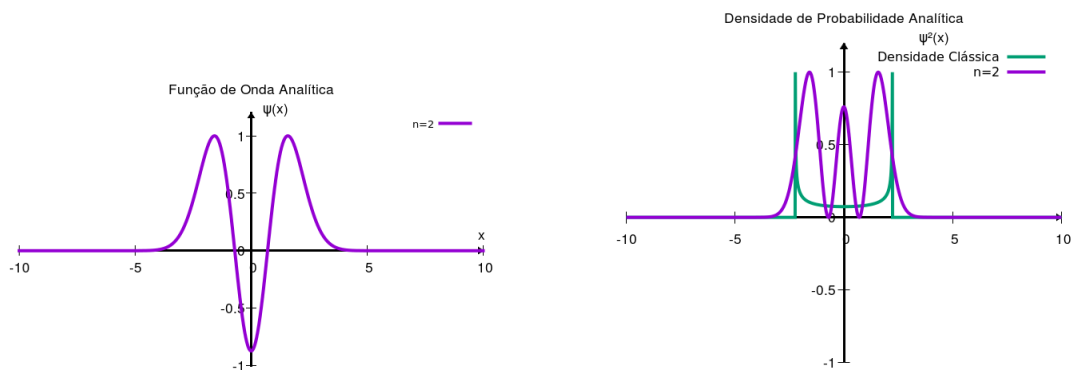


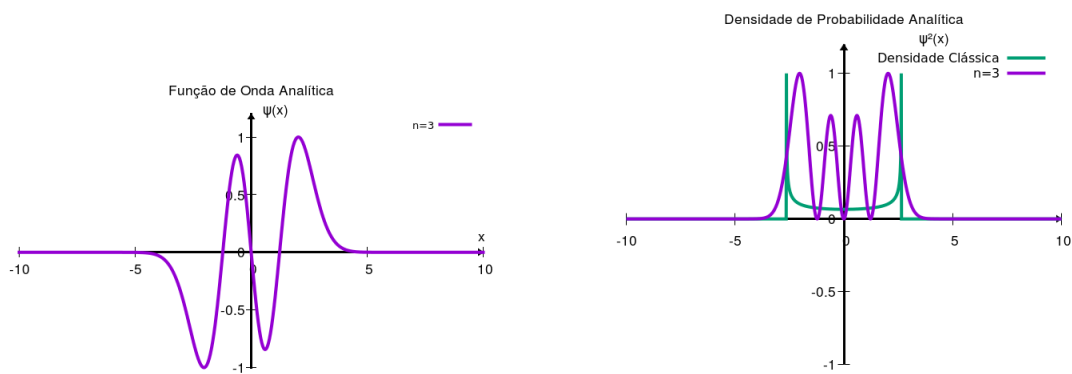
Figura 4: Estado Excitado: $n = 1$.



(a) Função de onda.

(b) Densidade de probabilidade.

Figura 5: Estado Excitado: $n = 2$.



(a) Função de onda.

(b) Densidade de probabilidade.

Figura 6: Estado Excitado: $n = 3$.

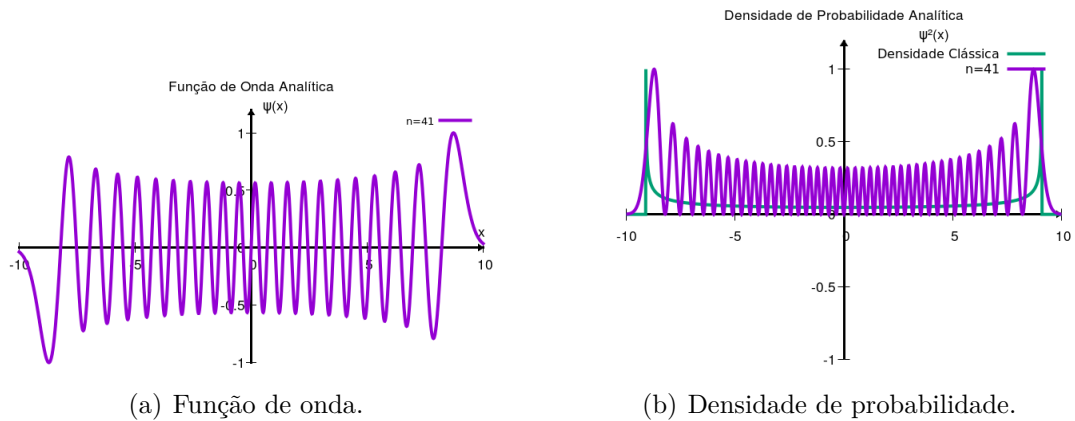


Figura 7: Estado Excitado: $n = 41$.

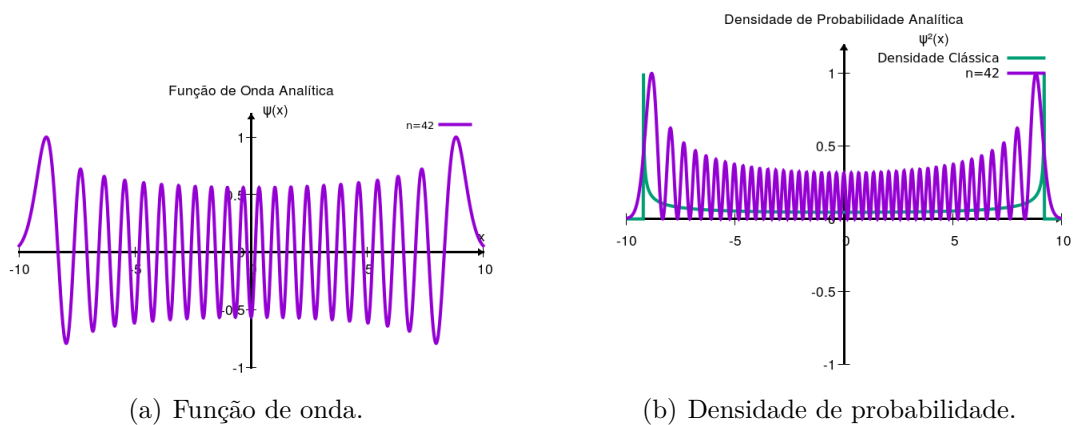


Figura 8: Estado Excitado: $n = 42$.

3 Método de Numerov

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

$$\frac{d^2y(x)}{dx^2} = s(x) - g(x)y(x). \quad (24)$$

Expandindo a equação diferencial em série de Taylor em torno de $x + \Delta x$

$$\begin{aligned} y(x + \Delta x) = & y(x) + \Delta x \frac{dy(x)}{dx} + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{d^2y(x)}{dx^2} \\ & + \frac{(\Delta x)^3}{6} \frac{d^3y(x)}{dx^3} + \frac{(\Delta x)^4}{24} \frac{d^4y(x)}{dx^4} + O[(\Delta x)^5], \end{aligned} \quad (25)$$

e em torno de $x - \Delta x$

$$\begin{aligned} y(x - \Delta x) = & y(x) - \Delta x \frac{dy(x)}{dx} + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{d^2y(x)}{dx^2} \\ & - \frac{(\Delta x)^3}{6} \frac{d^3y(x)}{dx^3} + \frac{(\Delta x)^4}{24} \frac{d^4y(x)}{dx^4} + O[(\Delta x)^5], \end{aligned} \quad (26)$$

e somando (25) e (26), as derivadas de termo ímpar se cancelam,

$$y(x + \Delta x) + y(x - \Delta x) = 2y(x) + (\Delta x)^2 \frac{d^2y(x)}{dx^2} + \frac{(\Delta x)^4}{24} \frac{d^4y(x)}{dx^4} + O[(\Delta x)^6]. \quad (27)$$

Escrevendo a equação geral (24) na forma

$$z(x) = \frac{d^2y(x)}{dx^2} = s(x) - g(x)y(x), \quad (28)$$

e somando as expansões de $z(x)$ em série de Taylor em torno de $x + \Delta x$ e $x - \Delta x$,

$$z(x + \Delta x) + z(x - \Delta x) = 2z(x) + (\Delta x)^2 \frac{d^2z(x)}{dx^2} + O[(\Delta x)^4]. \quad (29)$$

é possível obter uma equação para a quarta derivada de $y(x)$

$$\frac{d^4y(x)}{dx^4} = \frac{d^2z(x)}{dx^2} = \frac{z(x + \Delta x) + z(x - \Delta x) - 2z(x)}{(\Delta x)^2} + O[(\Delta x)^2], \quad (30)$$

onde, substituindo $z(x) = \frac{d^2y(x)}{dx^2} = s(x) - g(x)y(x)$,

$$\begin{aligned} \frac{d^4y(x)}{dx^4} = & \frac{s(x + \Delta x) - g(x + \Delta x)y(x + \Delta x)}{(\Delta x)^2} + \frac{s(x - \Delta x) - g(x - \Delta x)y(x - \Delta x)}{(\Delta x)^2} \\ & + \frac{2[s(x) - g(x)y(x)]}{(\Delta x)^2} + O[(\Delta x)^2]. \end{aligned} \quad (31)$$

Assim, a resolvendo para $y(x + \Delta x)$,

$$\begin{aligned} y(x + \Delta x) = & 2y(x) - y(x - \Delta x) + (\Delta x)^2 [s(x) - g(x)y(x)] + \frac{(\Delta x)^2}{12} \{s(x + \Delta x) \\ & - g(x + \Delta x)y(x + \Delta x) + s(x - \Delta x) - g(x - \Delta x)y(x - \Delta x) \\ & - 2[s(x) - g(x)y(x)]\}, \end{aligned} \quad (32)$$

e o agrupamento dos termos de y produz a fórmula de Numerov para resolução de equações diferenciais,

$$\begin{aligned} y(x + \Delta x) \left[1 + \frac{(\Delta x)^2}{12} g(x + \Delta x) \right] = & 2y(x) \left[1 - \frac{5(\Delta x)^2}{12} g(x) \right] \\ & - y(x - \Delta x) \left[1 + \frac{(\Delta x)^2}{12} g(x - \Delta x) \right] + \frac{(\Delta x)^2}{12} [s(x + \Delta x) \\ & + 10s(x) + s(x - \Delta x)] + O[(\Delta x)^6]. \end{aligned} \quad (33)$$

4 Implementação Numérica

A equação de Schrödinger independente do tempo (9) de um oscilador harmônico quântico simples é um exemplo de equação diferencial de segunda ordem. Comparando-a com a equação geral (24), é possível perceber que $s(x) = 0$, $g(x) = 2m/\hbar^2 [E - V(x)]$ e $y(x) = \psi(x)$. Portanto, a fórmula de Numerov (33) para a equação de Schrödinger se reduz a:

$$\psi(x + \Delta x) = \frac{(12 - 10f(x))\psi(x) - f(x - \Delta x)\psi(x - \Delta x)}{f(x + \Delta x)} \quad (34)$$

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

Para tratar o problema numericamente, a equação (34) precisa ser discretizada de forma que para cada ponto espacial, x , este será equivalente à um ponto x_i de uma rede discreta. Consequentemente, a solução pode ser reescrita como

$$\psi_{i+1} = \frac{(12 - 10f_i)\psi_i - f_{i-1}\psi_{i-1}}{f_{i+1}} \quad \text{e} \quad x = i\Delta x. \quad (35)$$

Dessa forma, é possível calcular a solução em todos os pontos do espaço levando em consideração dois pontos anteriores.

O algoritmo abaixo mostra o esquema da construção do método de Numerov:

1 Inicialização:

```
2   Constantes e parâmetros: estado  $n$ , variação de
    posição  $dx$ ;
3   Vetores: posição  $x_i$ , potencial  $V_i$ ;
4   Energia;
5   Laço de convergência:
6   Cálculo de  $f_i$  e definição do ponto de convergência,  $pc$ ;
7   Inicialização de  $y_i$  de acordo com paridade;
8   Cálculo de  $y_i$  de  $i=[0,pc]$  (esquerda para direita);
9   Recalcula energias;
10  Critério de matching:
11  Cálculo de  $y_i$  de  $i=[i_{max},pc]$  (direita para esquerda);
12  Verifica descontinuidade em  $y_{pc}$ ;
13  Recalcula energias;
14  Termina laço se convergência foi atingida;
15  Cálculo das probabilidades;
16  Imprime resultados.
```

A inicialização do código foi feita com a posição máxima, x_f , e o tamanho da rede tam de forma que a variação da posição seja $dx = x_d/tam$, além o estado, n , do oscilador. A constante de Planck² \hbar e a massa m utilizadas na equação de Schrödinger são consideradas unitárias. Como boa prática de programação, vetores de posição e potencial foram criados para que sejam calculados somente uma vez, reduzindo custo computacional.

O método de Numerov exige que a energia seja inicializada e seja, posteriormente, recalculada até que o critério de convergência seja atingido. Tal energia é inicializada pela média da energia mais alta e a mais baixa.

```
1  dx = xf/tam; //cálculo da variação espacial
2  for (i = 0; i < tam; i++) {
3      xn[i] = (double)i*dx; //cálculo da posição
4      V[i] = 0.5*xn[i]*xn[i]; //cálculo do potencial
5  }
6  eup = V[tam - 1]; //Energia inicializada no máximo de
    Potencial
7  edn = eup;
8  for (i = 0; i < tam; i++) {
9      if (eup < V[i])
10         eup = V[i]; //Recalcula energia mais alta (se
            houver)
11     if (edn > V[i])
```

²Constante reduzida de Planck $\hbar = \frac{h}{2\pi}$


```
12     edn = V[i];    //Recalcula energia mais baixa (se
13     }             houver)
14 Energia = (eup + edn)/2.0; //Energia total
```

Dentro do laço de convergência, a fórmula de Numerov é recalculada até que haja concordância entre o número de nós encontrados e o estado de energia, além de que a diferença entre as energias alta e baixa sejam menor que um certo erro. Para tal, é definido que o ponto de convergência pc será no limite clássico do oscilador que ocorre quando $E = V(x)$.

Devido à simetria da função de onda, a fórmula de Numerov é calculada para $x \geq 0$, sendo apenas replicada para $x < 0$. Consequentemente, sua inicialização depende da paridade de n , sendo $\psi_0 = 1$ e $\psi_1 = \frac{(12-10f_0)\psi_0}{2f_1}$ se n for par e $\psi_0 = 0$ e $\psi_1 = dx$ se n for ímpar.

```
1  do{
2      pc = -1;    //Inicializa o ponto de convergência
3      for (i = 0; i < tam; i++) {
4          fn[i] = -2.0*(Energia - V[i])*dx*dx/12.0;
5              //Inicialização de g(x)*dx^2/12
6          if (fn[i] == 0.)
7              fn[i] = 1e-20;    //Colocando valor diferente de
8              zero para que não ocorra divisão por zero.
9          if (fn[i] != sinal(fn[i], fn[i + 1])) //Se há
10              troca de sinal,
11              pc = i;    //no cálculo de g(x) então está no
12              limite clássico
13      }
14      for (i = 0; i < tam; i++) {
15          fn[i] = 1-fn[i];    //Cálculo de f(x)
16          y[i] = 0;
17      }
18      if (n % 2 == 0){ //Inicialização de  $\psi(x)$  a partir da
19          paridade de n
20          y[0] = 1.0;
21          y[1] = 0.5*(12.0 - 10.0*fn[0])*y[0]/fn[1];
22      } else {
23          y[0] = 0.0;
24          y[1] = dx;
25      }
26  }
```

A integração de $\psi(x)$ de zero até o ponto de convergência é feito pela

equação (35) enquanto uma contagem de nós é realizada. Como a função de onda só é calculada para $x \geq 0$, o número de nós é duplicado dependendo da paridade de n . A energia é recalculada pelo método da bisseção.

```
1  conta0 = 0;    //Conta a quantidade de nós que  $\psi(x)$  tem
2  for (i = 1; i <= pc - 1; i++) { //Cálculo de  $\psi(x)$ 
3      y[i+1] = ((12.0 - 10.0*fn[i])*y[i] -
4              fn[i-1]*y[i-1])/fn[i+1];
5      if (y[i] != sinal(y[i], y[i + 1])) //Verifica
        zeros
6      conta0++;
7  }
8  ypc = y[pc]; //Grava o valor de  $\psi(x)$  no ponto de
    convergência
9  if (n % 2 == 0)
10     conta0 = 2*conta0;
11 else
12     conta0 = 2*conta0 + 1;
13 if (conta0 != n) { //Cálculo da Energia por Bisseção
14     if (conta0 > n)
15         eup = Energia;
16     else
17         edn = Energia;
18     Energia = 0.5*(eup + edn);
19 }
```

A partir do momento em que o número de nós se iguala ao estado de energia, a integração inversa de $\psi(x)$ é realizada do valor máximo da posição até o ponto de convergência, sendo necessário inicializar os dois últimos pontos devido à condição de que $\psi(x) = 0$ quando $x \rightarrow \infty$. Os valores de $\psi(x)$ nessa integração são reescalados para ficar de acordo com os valores anteriormente calculados. Com a função de onda integrada em todos os pontos, é necessário calcular a diferença das derivadas direita e esquerda no ponto de convergência para verificar se a função é contínua no ponto de convergência e recalculer a energia. O laço de convergência termina quando a diferença entre as energias alta e baixa é pequena.

```
1  if (conta0 == n){
2      y[tam-1] = dx; //Inicialização do final da função
        de onda
3      y[tam-2] = (12. - 10.*fn[tam-1])*y[tam-1]/fn[tam-2];
```

```
4      for (i = tam - 2; i >= pc + 1; i--) { //Cálculo
        inverso de  $\psi(x)$ 
5      y[i-1] = ((12. - 10.*fn[i])*y[i] -
        fn[i+1]*y[i+1])/fn[i-1];
6      }
7      ypc = ypc/y[pc];
8      for (i = pc; i < tam; i++) { //Reescalonamento de  $\psi(x)$ 
9      y[i] = y[i] * ypc;
10     }
11     i = pc;
12     djump = (y[i+1] + y[i-1] - (14 - 12
        *fn[i])*y[i])/dx; //Diferença entre derivadas
13     if (djump * y[i] > 0.0) //Cálculo da energia
14         eup = Energia;
15     else
16         edn = Energia;
17     Energia = 0.5*(eup + edn);
18 }
19 }while(fabs(eup - edn) > 1e-6); //Fim do loop de
    convergência
```

Por fim, a função de onda é normalizada para 1 e replicada para $x \leq 0$ de acordo com a paridade de n .

```
1  for(i=0; i<tam; i++){ //Normaliza de acordo com o pico
2      if (fabs(y[i]) > fabs(maior))
3          maior = y[i];
4  }
5  for(i=0; i<tam; i++)
6      y[i] = y[i]/maior;
7  if(n%2==0){ //Se n par,  $\psi(-x) = \psi(x)$  para  $x < 0$ 
8      for (i = tam-1; i > 0; i--)
9          printf("%d\t%lf\t%g\t%g\t%g\t%g\n", i, -xn[i],
10             y[i], y[i]*y[i], Energia, V[i]);
11  }else{ //Se n ímpar,  $\psi(-x) = -\psi(x)$  para  $x < 0$ 
12      for (i = tam-1; i > 0; i--)
13          printf("%d\t%lf\t%g\t%g\t%g\t%g\n", i, -xn[i],
14             -y[i], y[i]*y[i], Energia, V[i]);
15  }
16  for (i = 0; i < tam; i++)
17      printf("%d\t%lf\t%g\t%g\t%g\t%g\n", i, xn[i], y[i],
18         y[i]*y[i], Energia, V[i]);
```

4.1 Critério de Matching

O critério para que a solução da equação de Schrödinger seja fisicamente aceitável é que suas autofunções $\psi_n(x)$ e suas primeiras derivadas sejam contínuas para todo x . Como as oscilações ocorrem somente dentro da região classicamente permitida e limitada por $[-x_{pc}, x_{pc}]$, onde $E_n \leq V(x)$, e a função de onda fora dessa região decai exponencialmente, então o ponto de convergência deve ser nessa inversão de comportamento.

Para obter esse *matching*, a função de onda deve ser integrada de $x = 0$ até $x = x_{pc}$ e de $x = x_f^3$ até x_{pc} de tal forma que os lados direito e esquerdo tenham o mesmo valor em x_{pc} . Portanto, para garantir a continuidade da função, a diferença entre as derivadas direita, $\psi_n^D(x)$, e esquerda, $\psi_n^E(x)$, deve ser zero. Assim, a partir das expansões de Taylor (25) e (26), as derivadas são calculadas

$$\begin{aligned} y_i^D &= \frac{-y_i^D + y_{i+1}^D - 0.5(\Delta x)^2 y_i^{D''}}{\Delta x} + O[(\Delta x)^3], \\ y_i^E &= \frac{y_i^E - y_{i+1}^E + 0.5(\Delta x)^2 y_i^{E''}}{\Delta x} + O[(\Delta x)^3], \end{aligned} \quad (36)$$

e, subtraindo-as, a descontinuidade é calculada

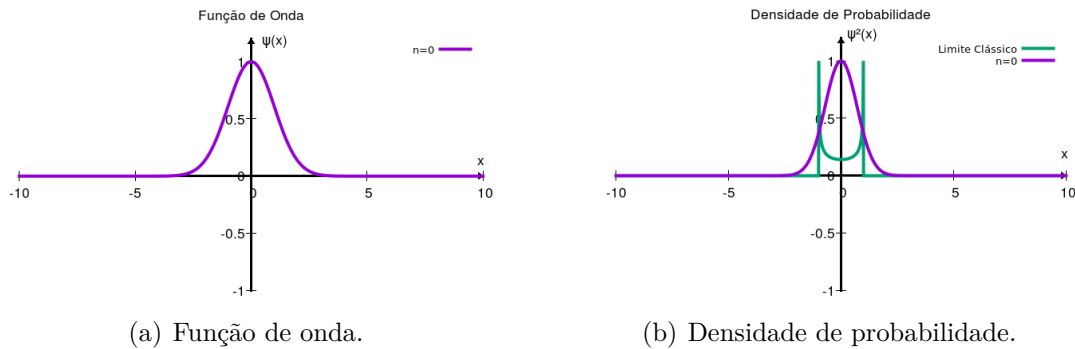
$$y_i^D - y_i^E = \frac{y_{i+1}^D + y_{i+1}^E - 2y_i + (\Delta x)^2 y_i''}{\Delta x} + O[(\Delta x)^3], \quad (37)$$

onde $y_i^D = y_i^E = y_i$. Novamente, fazendo a substituição da segunda derivada (??) e $f(x) = 1 + \frac{(\Delta x)^2}{12} g(x)$, a equação acima se torna

$$y_i^D - y_i^E = \frac{y_{i+1}^D + y_{i+1}^E - (14 - 12f_i)y_i}{\Delta x} + O[(\Delta)^2]. \quad (38)$$

Essa descontinuidade determina se o valor da energia está alto ou baixo demais. Isso se deve ao fato de que o ponto de convergência ocorre quando $E = V(x)$, portanto, se $E > V(x)$, então $y_i^D - y_i^E$ é positivo e a energia precisa ser ajustada com um valor menor e, se $E < V(x)$, então $y_i^D - y_i^E$ é negativo e a energia precisa ser ajustada com um valor maior. Quando os valores mais alto e mais baixo da energia se aproximam, a diferença entre as derivadas tende a zero e, consequentemente, a função é contínua.

³Considerando que x_f é um ponto onde $\psi(x) = 0$

Figura 9: Estado Fundamental: $n = 0$.

5 Resultados e Discussão

O oscilador harmônico quântico unidimensional tem seus valores de energia calculados analítica e numericamente, em termos adimensionais, e comparados na tabela (2).

Tabela 2: Níveis de energia do oscilador harmônico

n	E_n	Analítico	Numerov
0	E_0	0.5	0.500000
1	E_1	1.5	1.500000
2	E_2	2.5	2.500000
3	E_3	3.5	3.500000
41	E_{41}	41.5	41.502354
42	E_{42}	42.5	42.505426

As funções de onda para os diferentes estados de energia em uma simulação com valor máximo de $x_f = 10$ e discretização $dx = 0.01$, são apresentadas pelas figuras (9) até (14). Nelas, é possível perceber que quanto maior o n , maior é a área onde ocorre as oscilações, devido ao fato de que os limites clássicos são maiores conforme a energia sobre o sistema aumenta.

De modo geral, as funções de onda e das densidades de probabilidades calculadas pelo método de Numerov se comportam da mesma maneira das funções de onda analíticas, vistas nas figuras (3) até (8). Porém, nos estados excitados $n = 41$ e $n = 42$, o limite clássico está muito próximo do x_f e, portanto, foi truncada para zero em $x = x_f$. Para contornar esse problema, x_f deve ser pelo menos o dobro que x_{pc} .

Como esperado, os limites clássicos aumentaram para valores maiores de n . Na tabela (3), há uma comparação dos valores teóricos com os valores encontrados.

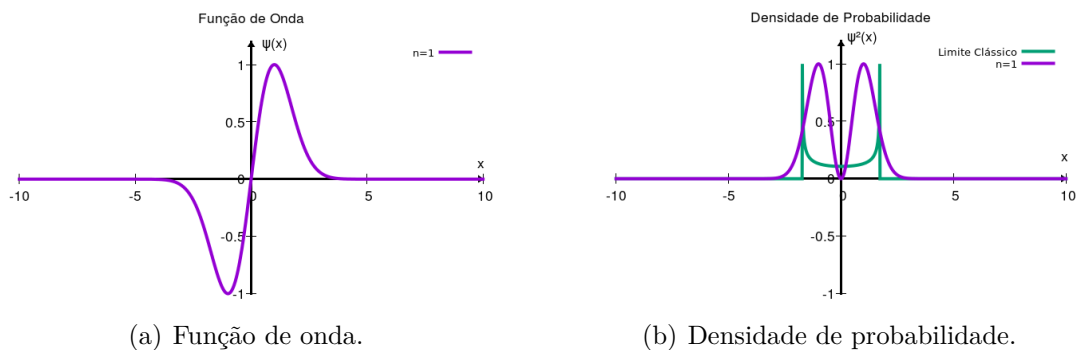


Figura 10: Estado Excitado: $n = 1$.

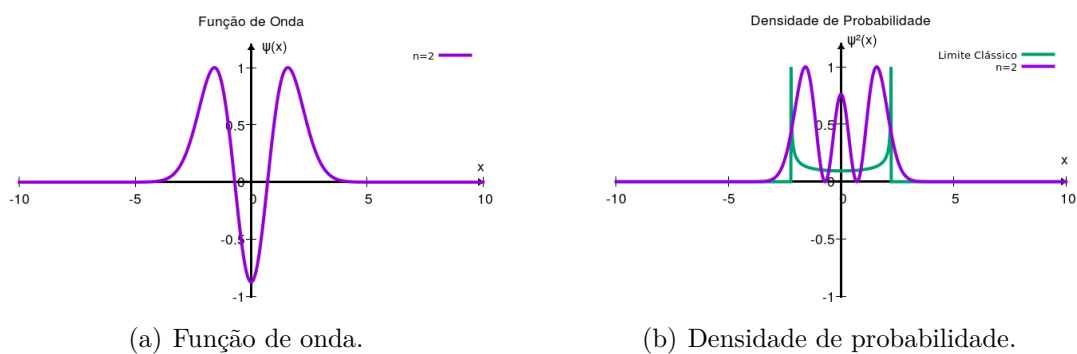


Figura 11: Estado Excitado: $n = 2$.

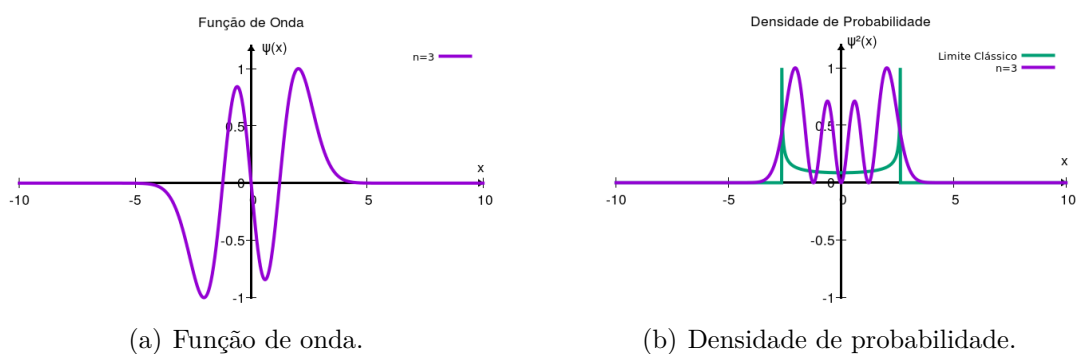


Figura 12: Estado Excitado: $n = 3$.

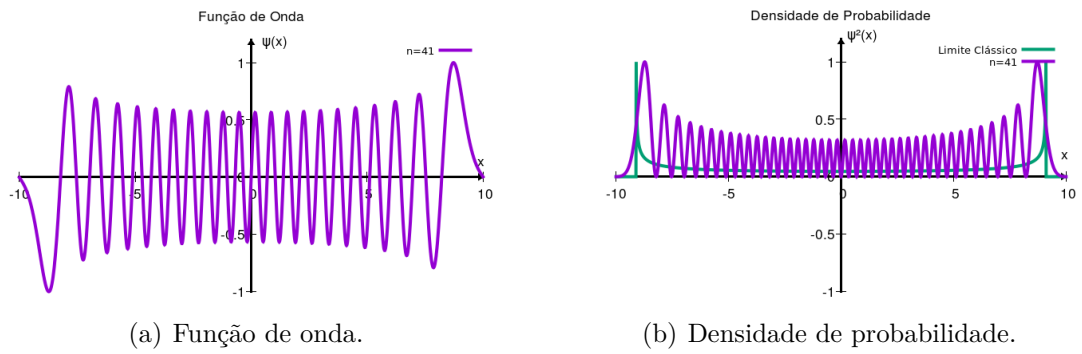


Figura 13: Estado Excitado: $n = 41$.

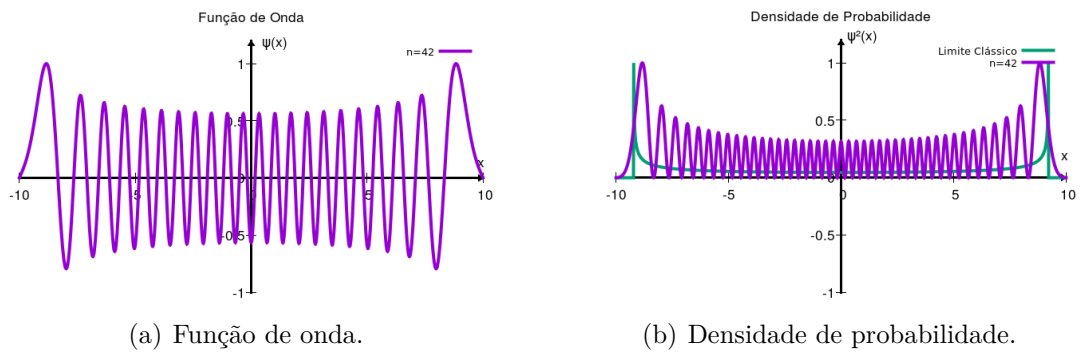


Figura 14: Estado Excitado: $n = 42$.

Tabela 3: Limites clássicos

n	Esperado	Numerov
0	1.000000	1.00
1	1.732050	1.73
2	2.236068	2.23
3	2.645751	2.64
41	9.110436	9.11
42	9.219544	9.22

Os resultados expostos nas tabelas (2) e (3) mostram que a eficiência do método de Numerov para a solução do oscilador harmônico quântico. Durante o cálculo das energias, só obtive erros na terceira casa decimal para os valores de $n = 41, 42$, devido à propagação dos erros de ordem seis da fórmula de Numerov (33). Consequentemente, para n grande, o método se torna menos eficiente.

6 Conclusão

Neste trabalho, o método de Numerov foi aplicado ao problema do oscilador harmônico simples para 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 (33). Os valores de energia encontrados foram muito precisos para os primeiros estados, enquanto que para os mais altos, os valores começaram a apresentar erro de $10^{-4}\%$. Uma forma de melhorar a precisão para n grande é aumentar os valores de x_f , de modo que o mesmo seja pelos menos duas vezes maior que o limite clássico. Dessa forma, a função de onda pode convergir para zero e o cálculo da energia ser mais preciso.

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.