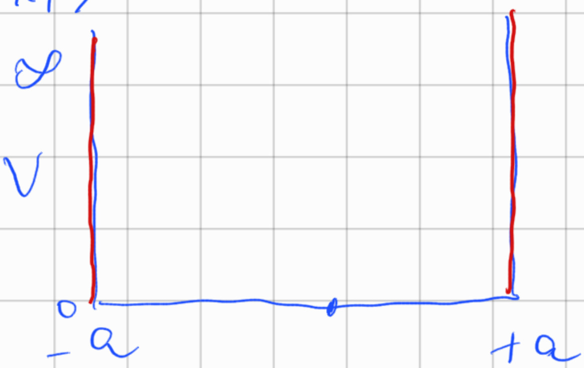
1.1

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x)$$

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| \le a \\ +\infty, & |x| > a \end{cases}$$

→ Resumindo:



Ou seja, no intervalo considerado $[-a, a]$ $V(x=0)$ e então:

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \cancel{V(x)\varphi(x)} = E\varphi(x) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow -\frac{1}{2}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = E\varphi(x) \Rightarrow \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = -2E\varphi(x)$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + 2E\varphi(x) = 0 \quad (1)$$

Método de Numerov:

Equação do Tipo:

$$\frac{\partial^2 y(x)}{\partial x^2} + f(x)y(x) = S(x) \quad (2)$$

Comparando (1) e (2) temos:

$$\varphi(x) \to y(x) \qquad g \to 2E \qquad S(x) = 0 \; (*)$$

$(**)$

Para calcular os termos em $y(k+1)$ aplicamos o método progressivel.

$$y(k+1) = \left(1 + \frac{h^2}{12} g(k+1)\right)^{-1} \Big[-\left(1 + \frac{h^2}{12} g(k-1)\right) \varphi(k-1)$$

$$+ 2\left(1 - \frac{5h^2}{12} g(k)\right) y(k) +$$

$$\cancel{+ \frac{h^2}{12}\left(S(k-1) + 10 S(k) + S(k+1)\right)} \Big]$$

↳ De $(*)$ $S(x) = 0$

Como neste caso g não depende de x, temos:
(ver $(**)$)

$$\varphi(k+1) = \underbrace{\left(1 + \frac{h^2}{12} g\right)}_{aux1}^{-1} \Big[-\overbrace{\left(1 + \frac{h^2}{12} g\right)}^{aux1} \varphi(k-1) +$$

$$+ \overbrace{2\left(1 - \frac{5h^2}{12} g\right)}^{aux2} \varphi(k) \Big]$$

$$\varphi(k+1) = \left(-aux1\, \varphi(k-1) + aux2\, \varphi(k)\right) / aux1$$

Condição fronteira:

Do enunciado, $\varphi(x \leq -a) = 0 \Rightarrow \varphi(-a) = 0$

e $\varphi(x \geq a) = 0 \Rightarrow \varphi(a) = 0$ Dúvida

Como o problema encontra-se entre $-a : h : a \Rightarrow \varphi(-a) = \varphi[1] = 0$ e

$\varphi(a) = \varphi[N] = 0$

Para iniciar o método de numerov:

$\varphi(-a+h) \Rightarrow \varphi[2] \Rightarrow$ valor qualquer.

e $\varphi(-a+h)$ é um valor arbitrário.

$\Rightarrow$ Shooting: método da secante:

$$m = \frac{result(i) - result(i-1)}{guess(i) - guess(i-1)}$$

$\downarrow$

declive

result $\rightarrow \varphi$

guess $\rightarrow E$

Assim:

$$m = \frac{\varphi(i) - \varphi(i-1)}{E(i) - E(i-1)}$$

Como ver q

E = guess ?

φ = result

$B = \varphi'(t_f)$

Como $\varphi(x \geq a) = 0$ $\Big\}$ $B = 0$

e então:

$$guess(i+1) = guess(i) + \frac{B - result(i)}{m}$$

logo

$$E(i+1) = E(i) - \frac{\varphi(i)}{m}$$

---

2) Equações a resolver:

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left[\frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{1}{r}\right] u(r) = E u(r)$$

$$\Leftrightarrow -\frac{1}{2}\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left[\frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{1}{r}\right] u(r) - E u(r) = 0 \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow -\frac{1}{2}\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left[\frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{1}{r} - E\right] u(r) = 0$$

multiplicando ambos os termos por -2 vem:

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left[\frac{-\cancel{2}\, l(l+1)}{\cancel{2} r^2} + \frac{2}{r} + 2E\right] u(r) = 0$$

$$\Rightarrow \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left(\frac{-l(l+1)}{r^2} + \frac{2}{r} + 2E \right) u(r) = 0 \quad (1)$$

Método de Numerov:

Equação do Tipo:

$$\frac{\partial^2 y(x)}{\partial x^2} + g(x) y(x) = S(x) \quad (2)$$

Comparando (1) e (2) verifica-mos que:

$$y(x) \to u(r)$$

$$g = \frac{-l(l+1)}{r^2} + \frac{2}{r} + 2E \quad \text{e} \quad S(x) = 0$$

Condições fronteira:

$$u(0) = 0 \quad \text{e} \quad \lim_{r \to \infty} u(r) = 0$$

Obriga a usar o método de Numerov regressivo:

$$y_{k-1} = \underbrace{\left(1 + \frac{h^2}{12} g_{k-1}\right)^{-1}}_{\text{aux1}(k-1)} \left[2 \underbrace{\left(1 - \frac{5h^2}{12} g_k\right)}_{\text{aux2}(k)} y_k - \overbrace{\left(1 + \frac{h^2}{12} g_{k+1}\right)}^{\text{aux1}(k+1)} y_{k+1} \cancel{+ \frac{h^2}{12}\left(S_{k-1} + 10 S_k + S_{k+1}\right)} \right]$$

0 pois $S(x) = 0$

e assim e como agora g depende de r temos:

$$g(i) = -\frac{l(l+1)}{r(i)^2} + \frac{2}{r(i)} + 2E$$

e temos também que:

$$aux_1(i) = \left(1 + \frac{h^2}{12} g(i)\right)$$

$$aux_2(i) = 2\left(1 - \frac{5h^2}{12} g(i)\right)$$

Podem ser construídos os vectores no início

No método de Numerov temos então:

$$u(k-1) = \left[-aux1(k+1)\,u(k+1) + aux2(k)\,u(k)\right] / aux_1(k-1)$$

Shooting: result $= u(r=0)$

e $u(0) = 0 \Rightarrow B = 0$

$u(1) = $ interp1 ((......) ....

$u(N) = 0$

$u(N-1) \rightarrow$ arbitrário.