

# Atomul de hidrogen. Vizualizarea orbitalilor. Simulari numerice

Stefan - Razvan Anton

*Facultatea de Stiinte Aplicate.*

---

## Abstract

Atomul de hidrogen este studiat utilizand ca procedura de discretizare a spatiului metoda diferențelor finite. Într-o astfel de procedură ecuația lui Schrödinger atemporală pentru atomul de hidrogen este redusă la rezolvarea unei probleme de vectori și valori proprii. Valorile numerice obținute sunt nivelul energetic al orbitalilor și vectorii ce alcătuiesc funcțiile de undă ale acestora. Rezultatele sunt comparabile cu realitatea, eroarea cea mai mare (8.85%) fiind la determinarea nivelului energetic al orbitalului  $1s$ .

*Keywords:* Ecuatia lui Schrödinger atemporală; metoda diferențelor finite; metode numerice în calculul ecuațiilor cu derivate partiale;

---

## 1. Introducere

## 2. Rezultate

În urma rezolvării problemei de vectori și valori proprii obținem două rezultate principale. Energiile pentru fiecare orbital în ordine crescătoare (cu mențiunea că energia obținută în urma rezolvării problemei de vectori și valori proprii este în unități atomice) și vectorii ce alcătuiesc funcțiile de undă.

### 2.1. Energiile orbitalilor

Valorile energiei primilor 18 orbitali atomici au fost calculate pentru multiple valori ale numărului de noduri pe fiecare axă N. Observăm faptul că, în total, eroarea dintre energiile calculate numeric și cele analitice scade odată cu creșterea lui N.

Observam de asemenea ca pentru orbitali 1s, 2s, 3s eroarea este semnificativ mai mare decat eroarea pentru ceilalti orbitali. Acest lucru este generat de faptul ca influenta singularitatii din punctul de coordonate (0,0,0) are un efect mai mare asupra valorii numerice a energiei acestor orbitali. Pentru scaderea erorii de calcul a valorii energiei calculata numeric pentru acesti orbitali putem incerca marirea numerului de noduri in care discretizam spatiul. Acest procedeu va fi discutat in sectiunea 3.

Un alt lucru remarcabil este ca nu pentru toate valorile energiilor orbitalilor o crestere in discretizarea spatiului duce la o scadere in eroarea de calcul. De exemplu, pentru orbitalii  $2px$ ,  $2py$ ,  $2pz$  eroarea scade la trecerea de la  $N = 150$  la  $N = 140$ . Acelasi lucru este observat pentru orbitalii  $3px$ ,  $3py$ ,  $3pz$  la trecerea de la  $N = 150$  la  $N = 140$  si de la  $N = 140$  la  $N = 130$ . Ajungem astfel la concluzia ca fiecare orbital are un  $N$  ideal, pentru care eroarea relativa este minima, dar acest lucru nu inseamna ca acelasi N este ideal pentru alt orbital. Presupunem ca cele mai precise valori ale energiilor s-ar putea obtine pentru o discretizare variabila o data cu distanta fata de nucleu (discretizare mai fina aproape de nucleu si mai rara la distante mari fatad e nucleu).

In continuare avem sase tabele corespondente cu energiile primilor 18 orbitali calculate pe un spatiu in forma de cub cu latura de  $50\text{\AA}$ , in care fiecare axa a fost discretizata in 150, 140, 130, 120, 110 si 100 de noduri.

Orbital	$E_{analytic}(eV)$	$E_{numeric}(eV)$	Eroare (%)
1s	-13.605	-12.40031	-8.85
2s	-3.40125	-3.262804	-4.07
2px	-3.40125	-3.39791	-0.09
2py	-3.40125	-3.39791	-0.09
2pz	-3.40125	-3.39791	-0.09
3s	-1.51166	-1.46621	-3.01
3px	-1.51166	-1.50893	-0.18
3py	-1.51166	-1.50893	-0.18
3pz	-1.51166	-1.50893	-0.18
3dz2	-1.51166	-1.49864	-0.86
3dxz	-1.51166	-1.49864	-0.86
3dyz	-1.51166	-1.49651	-1.00
3d(x2-y2)	-1.51166	-1.49651	-1.00
3dxy	-1.51166	-1.49651	-1.00
4s	-0.85031	-0.83297	-2.03
4px	-0.85031	-0.83737	-1.52
4py	-0.85031	-0.83737	-1.52
4pz	-0.85031	-0.83737	-1.52

Table 1: Energiile primilor 18 orbitali pentru  $N=150$  cand dimensiunea spatiului considerat este  $[50:50:50]\text{\AA}$ .

### 3. Discutie

[1]

Folsind functia ce aproximeaza modul in care creste timpul de executie, calculam faptul ca pentru  $N = 380$  avem nevoi de de aproximativ 85400 de secunde, adica aproximativ 24 de ore,

Lucru care teoretic este posibil, dar practic tebuie facute doua mentiuni importante:

- 1) Modul in care timpul de executie creste o data cu numerul de noduri pe fiecare axa depinde de sistemul de calcul pe care se ruleaza programul.
- 2) Programul este imposibil de rulat pentru  $N = 380$ . Daca consideram matricea  $A$  cu elemente de tip float si dimensiunea  $380^3 \times 380^3$  obtinem o cantitate de RAM necesara pentru rularea algoritmului numeric de aproximativ 12 Pb (de 250000 de ori mai mult decat cantitatea de ram necesara pentru a rula algoritmul numeric in cazul  $N = 150$ ).

#### **4. Concluzii**

#### **References**

- [1] N. Lambert, Numerical solutions of schrödinger's equation, tb2 (2001).