

Resumo:

A proposta de nosso trabalho é o cálculo numérico das funções de onda do átomo de Hidrogênio. Estas funções podem ser obtidas de forma analítica, através da solução da equação de Schroedinger para o caso não relativístico. Entretanto, a solução numérica permite compreender as bases do método para o cálculo das funções de onda dos átomos de muitos elétrons, através da modificação do potencial eletrostático ao qual o elétron está submetido. Na primeira etapa do estudo analisamos a teoria envolvida nesta abordagem. Já na segunda etapa calculamos as funções de onda e permitindo o uso de potenciais modificados para o estudo de diversos casos ilustrativos desta técnica.

Equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t) \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}$$

Na forma independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi$$

A partir da forma independente do tempo foi possível separar as variáveis na forma polar, assim trabalhamos com a forma radial da equação

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\mu}{\hbar} [E - V(r)] R = l(l+1) \frac{R}{r^2}$$

Com as variáveis separadas podemos calcular as funções de ondas a partir de métodos numéricos.

$$\frac{d^2 y}{dr^2} = \left(\lambda - \frac{2Z}{r} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) y$$

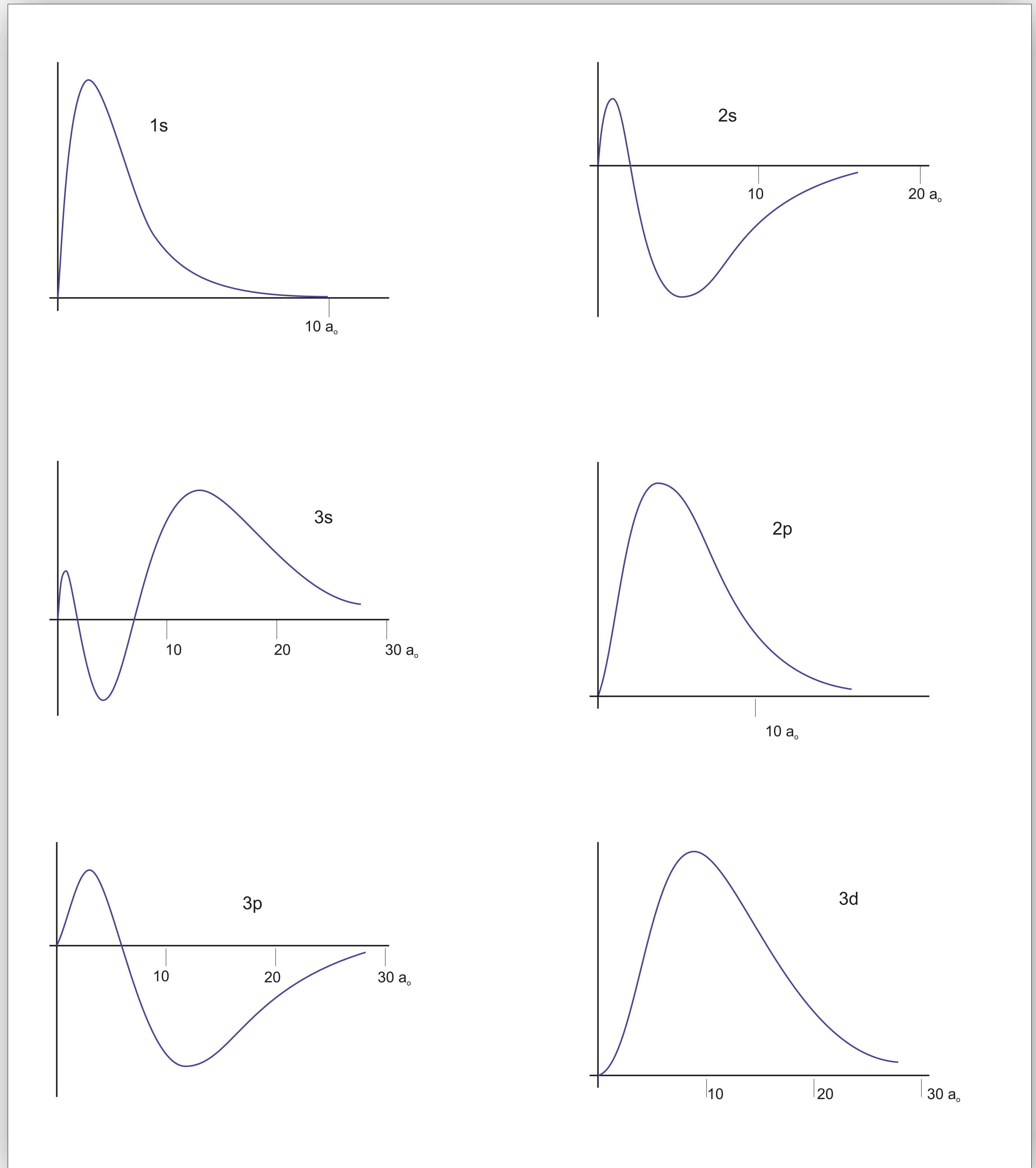
Manipulando as equações:

$$\frac{y_{(i+1)} - 2y_i + y_{(i-1)}}{\Delta^2} = \left(\lambda - \frac{2Z}{r_i} + \frac{l(l+1)}{r_i^2} \right) y_i$$

Após todas as manipulações matemáticas, obtemos equações diferenciais para r tendendo a zero e para r tendendo a infinito, em que A e B são os coeficientes não nulos que fazem parte do ajuste fino do processo, além de serem proporcionais.

$$y_{r \rightarrow 0} = Ar^{(l+1)} \quad y_{r \rightarrow \infty} = Bre^{-r\sqrt{\lambda}}$$

Resultados Gráficos:



Resultados para coeficientes inadequados, é possível perceber que a derivada da função não é contínua.

