

# ALGORITMO PARA OBTENÇÃO DA FUNÇÃO DE ONDA RADIAL DO HIDROGÊNIO NO SCILAB

OLIVEIRA, William Nocêra de<sup>1</sup>

RU 2481453

FONSECA, Edimar Fonseca da<sup>2</sup>

## RESUMO

Este artigo trata da criação de um algoritmo para obtenção da parte radial da função de onda do átomo de hidrogênio no Scilab. Portanto surge a seguinte questão, como criar um algoritmo no software Scilab que forneça a função de onda radial do hidrogênio mediante a entrada dos números quântico principal ( $n$ ) e azimutal ( $l$ )? Sendo que podemos usar algoritmos para facilitar a obtenção de soluções matemáticas. O objetivo principal deste artigo é criar um algoritmo no software Scilab que resolva de forma automática a equação de Schrödinger independente do tempo para o átomo de hidrogênio e forneça a parte radial da função de onda. Para isso, foram utilizados materiais bibliográficos já elaborados para a fundamentação dos cálculos e do algoritmo. Esta tarefa será percebida no decorrer do desenvolvimento do artigo, através da apresentação da equação de Schrödinger dependente do tempo, da obtenção da equação independente do tempo e da equação radial do hidrogênio, para então chegar à função de onda radial, a qual é utilizada para a criação do algoritmo no ambiente de programação do Scilab. O procedimento feito forneceu o algoritmo desejado com a ressalva de que o resultado não está em sua forma simplificada, necessitando a simplificação manual.

**Palavras-chave:** Algoritmo. Scilab. Função de Onda Radial. Hidrogênio.

## 1 INTRODUÇÃO

A equação de Schrödinger, utilizada no meio acadêmico-científico, é responsável por fornecer a função de onda usada na determinação da densidade de

---

<sup>1</sup> Aluno do Centro Universitário Internacional UNINTER. Artigo apresentado como Trabalho de Conclusão de Curso, 02-2021.

<sup>2</sup> Professor Orientador no Centro Universitário Internacional UNINTER.

probabilidade de se encontrar uma partícula em determinada posição e tempo em um sistema quântico.

Em sua forma dependente do tempo é uma equação diferencial parcial de segunda ordem acompanhada da unidade imaginária  $i$ , ou  $\sqrt{-1}$ . Mas quando independente do tempo passa a ser uma equação diferencial ordinária de segunda ordem, uma forma mais simples do que a citada anteriormente.

Apesar de simples, manualmente leva tempo e requer atenção em sua resolução, então é possível aplicar algoritmos computacionais facilitando a obtenção de sua solução.

Com isso surge a questão, como criar um algoritmo no Scilab que forneça a função de onda radial do hidrogênio mediante a entrada dos números quântico principal ( $n$ ) e azimutal ( $l$ )?

O objetivo deste artigo é criar um algoritmo no software Scilab que resolva de forma automática a equação de Schrödinger independente do tempo para o átomo de hidrogênio e forneça a parte radial da função de onda. Para tanto, percorrerá os seguintes objetivos específicos:

- Apresentar a equação de Schrödinger dependente do tempo;
- Demonstrar como se obtém a equação independente do tempo;
- Explicar como se obtém a equação de onda radial do hidrogênio;
- Criar um algoritmo no Scilab, que forneça a parte radial da função de onda do átomo de hidrogênio, utilizando a forma explícita dos polinômios associados de Laguerre.

Inicialmente é dado um contexto sobre o comportamento dual onda-partícula de acordo com Halliday e é apresentado um modelo para descrever o novo tipo de onda, a onda de matéria, que de acordo com Ruzzi, é a equação de Schrödinger.

A partir da equação de Schrödinger dependente do tempo, é demonstrado como é obtida a equação independente do tempo. Também são explicadas as características desse tipo de solução, de acordo Griffiths, e calculado a energia esperada do sistema utilizando o operador hamiltoniano retirado de Lisboa.

Para a obtenção da equação radial do hidrogênio, são feitas manipulações algébricas das fórmulas de distância entre as partículas, da massa total e do centro de massa do sistema e uso do método da separação de variáveis no decorrer dos cálculos. Em que a constante de separação utilizada é  $l \cdot (l + 1)$ , de acordo com Griffiths.

Para a criação do algoritmo é utilizada a função de onda do hidrogênio e a fórmula geral dos polinômios associados de Laguerre, ambos de acordo com Arfken.

Para atingir os objetivos descritos, a metodologia utilizada foi a pesquisa bibliográfica, pois os cálculos e o algoritmo estão fundamentados em conceitos retirados de livros já elaborados.

## **2 CRIAÇÃO DO ALGORITMO: DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER AO ALGORITMO NO SCILAB**

A partir do início do século XX começou a surgir uma nova visão a cerca dos fenômenos relacionados a partículas subatômicas, correlacionando-as tanto a um comportamento de partícula como a um comportamento de onda. Conforme Halliday (2016),

Em 1924, o físico francês Louis de Broglie propôs a seguinte linha de raciocínio: um feixe luminoso é uma onda, mas transfere energia e momento a partículas de matéria em eventos pontuais, por meio de “pacotes” chamados fótons. Por que um feixe de partículas não pode ter as mesmas propriedades? Em outras palavras, por que não podemos pensar em um elétron, ou qualquer outra partícula, como uma onda de matéria que transfere energia e momento a outras partículas de matéria em eventos pontuais? (HALLIDAY, 2016, p. 415-416)

Ao ser emitida e detectada, a luz se comporta como partícula, demonstrado através do efeito fotoelétrico, em que um feixe de luz é incidido em um metal fazendo com que os fótons transfiram energia aos elétrons do metal movimentando-os, e se comporta como onda enquanto se desloca, visto que possui características das ondas, a luz difrata, interfere, reflete e refrata.

De Broglie considerou que havia uma correspondência entre momento linear ( $p$ ) e o número de onda ( $k$ ), e entre energia ( $E$ ) e frequência ( $f$ ), grandezas ligadas à natureza corpuscular e ondulatória dos fenômenos, e chegou às seguintes hipóteses.

$$\lambda_{de\ Broglie} = \frac{h}{p} \rightarrow p = \hbar \cdot k$$

$$f = \frac{E}{h} \rightarrow E = \hbar \cdot \omega$$

Em que,  $h$  é a constante de Planck,  $\hbar$  é a constante de Planck dividido por  $2\pi$ ,  $k$  é o número de onda e  $\omega$  é a frequência angular.

Ainda era necessário um modelo matemático que auxiliasse na análise dessas ondas de matéria. Sendo o mais usual, segundo Ruzzi (2012),

a formulação de Schrödinger, que faz uso da função de onda, que é um ente matemático que carrega informações sobre o ente físico (por exemplo um elétron) em questão. Essas informações são probabilidades. A função de onda descreve com qual probabilidade um ente físico pode ser encontrado em determinada região do espaço. (RUZZI, 2012, p. 56)

Da referida formulação surge a equação de Schrödinger:

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \Psi_{(x,y,z,t)}}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \nabla^2 + V_{(x,y,z,t)} \right] \cdot \Psi_{(x,y,z,t)} \quad (1)$$

Que é uma equação diferencial parcial de segunda ordem, com a unidade imaginária  $i$ , o já mencionado  $\hbar$ , um potencial representado pela função  $V_{(x,y,z,t)}$ , o laplaciano  $\nabla^2$ , a massa  $m$  e a função de onda  $\Psi_{(x,y,z,t)}$ .

Ao considerar apenas uma dimensão a equação (1) é representada da seguinte forma:

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \Psi_{(x,t)}}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{(x,t)} \right] \cdot \Psi_{(x,t)} \quad (2)$$

E ainda, ao fazer  $\int_a^b |\Psi_{(x,t)}|^2 dx$ , se obtém a probabilidade de encontrar a partícula entre  $a$  e  $b$  em um tempo  $t$ .

## 2.1 EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER INDEPENDENTE DO TEMPO

Através do método de separação de variáveis podemos considerar que uma solução geral para a equação de Schrödinger unidimensional, com o potencial  $V(x)$  dependente apenas da posição, possa ser escrita como:

$$\Psi_{(x,t)} = \psi(x) \cdot \varphi(t)$$

Ao derivar  $\Psi_{(x,t)}$  uma vez em relação a  $t$  e duas vezes em relação a  $x$ :

$$\frac{\partial \Psi_{(x,t)}}{\partial t} = \psi(x) \cdot \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} \qquad \frac{\partial^2 \Psi_{(x,t)}}{\partial x^2} = \varphi(t) \cdot \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2}$$

E substituir na equação (2) junto com o potencial independente do tempo:

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

Podemos tratar algebricamente dividindo ambos os lados por  $\psi(x) \cdot \varphi(t)$ , e chegarmos a um resultado importante:

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{1}{\varphi(t)} \cdot \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{1}{\psi(x)} \cdot \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x)$$

As variáveis  $x$  e  $t$  estão em lados diferentes da equação fazendo com que a igualdade seja mantida apenas se ambos os lados forem uma constante, convenientemente considerada  $E$ .

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{1}{\varphi(t)} \cdot \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = E \qquad (3) \qquad -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{1}{\psi(x)} \cdot \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x) = E \qquad (4)$$

Uma solução possível para (3) é:

$$\frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = -i \cdot \frac{E}{\hbar} \cdot \varphi(t)$$

$$\varphi(t) = C \cdot e^{-i \cdot \frac{E}{\hbar} \cdot t}$$

Podemos incorporar a constante  $C$  na função  $\psi(x)$ , obtendo:

$$\varphi(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

No entanto, para (4) a solução dependerá da dimensão e potencial usados:

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x) \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x) \quad (5)$$

Esta é a equação de Schrödinger independente do tempo, uma equação diferencial ordinária de segunda ordem, e pode ser usada em mais de uma dimensão, com o auxílio da mudança de coordenadas, e com diferentes tipos de potenciais.

Retornando à solução geral  $\Psi_{(x,t)}$  e substituindo  $\varphi(t)$ , podemos concluir que essas soluções possuem características interessantes, são estados estacionários e tem a energia bem definida, ou seja, “Embora a própria função de onda, dependa (obviamente) de  $t$ , a densidade de probabilidade não depende” (GRIFFITHS, 2011, p. 19) e “uma solução separável tem como propriedade que toda medição da energia total deve certamente resultar no valor  $E$ .” (GRIFFITHS, 2011, p. 20)

Ao calcularmos a densidade de probabilidade, verificamos a independência do tempo em relação à distribuição de probabilidade:

$$|\Psi_{(x,t)}|^2 = \Psi_{(x,t)}^* \cdot \Psi_{(x,t)} = \left(\psi(x) \cdot e^{i\frac{E}{\hbar}t}\right) \cdot \left(\psi(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\right) = \psi(x) \cdot \psi(x) = |\psi(x)|^2$$

Para representar a constante de igualdade entre as equações 3 e 4 foi utilizada a letra  $E$ , de energia, pois é a energia do sistema e é um valor definido. Ao calcular a energia total esperada, verificamos isso:

$$\langle \hat{H} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* \cdot \hat{H} \cdot \psi(x) dx$$

O  $\hat{H}$  é chamado de operador hamiltoniano da equação de Schrödinger e “é a soma do operador energia cinética mais energia potencial.” (LISBÔA, 2020, p. 106)

$$\hat{H}_{(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x})} = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

Este operador tem uma representação na mecânica clássica,  $H_{(x,p)} = \frac{p^2}{2 \cdot m} + V(x)$ , com  $p$  associado a  $-i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial x}$ .

Usando o operador hamiltoniano na equação (5) temos que  $\hat{H} \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)$  e substituindo esta igualdade no cálculo da energia esperada:

$$\langle \hat{H} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* \cdot E \cdot \psi(x) dx = E \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* \cdot \psi(x) dx$$

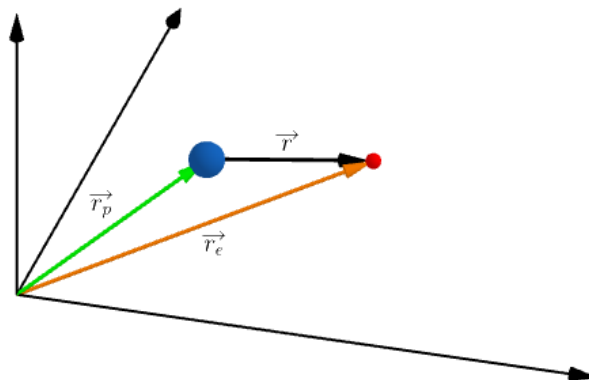
Agora considerando que a função de onda  $\psi(x)$  esteja normalizada, ou seja,  $\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* \cdot \psi(x) dx = 1$ , chega-se a conclusão que a energia total esperada é a própria constante  $E$ .

$$\langle \hat{H} \rangle = E$$

## 2.2 EQUAÇÃO RADIAL DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO

O átomo de hidrogênio é uma estrutura formada por um próton no núcleo e um elétron, conforme a figura a seguir:

**Figura 1 – Sistema próton-elétron e suas distâncias**



Fonte: Geogebra

Em um sistema de três dimensões as posições do próton e do elétron em relação à origem são representadas, respectivamente, por  $\vec{r}_p$  e  $\vec{r}_e$ , que são as distâncias entre a origem e cada partícula. A distância  $\vec{r}$  entre o próton e o elétron é dada pela subtração,

$$\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_p \quad (6)$$

Outros dois conceitos necessários na análise desse sistema são a massa total e o centro de massa (com  $m_p$  e  $m_e$  a representação das massas de cada partícula), respectivamente sendo,

$$M = m_p + m_e \quad (7) \quad \vec{R} = \frac{m_p \cdot \vec{r}_p + m_e \cdot \vec{r}_e}{M} \quad (8)$$

Ao expressar  $\vec{r}_p$  e  $\vec{r}_e$  em termos de  $M$ ,  $\vec{R}$  e  $\vec{r}$  (ver Apêndice A), obtemos:

$$\vec{r}_p = \vec{R} - \frac{m_e \cdot \vec{r}}{M} \quad \vec{r}_e = \vec{R} + \frac{m_p \cdot \vec{r}}{M}$$

Com isso podemos relacionar o momento individual das duas partículas e expressá-lo também em termos de  $M$ ,  $\vec{R}$  e  $\vec{r}$ :

$$\vec{p}_p = m_p \cdot \frac{d\vec{r}_p}{dt} = m_p \cdot \left( \frac{d\vec{R}}{dt} - \frac{m_e}{M} \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} \right)$$

$$\vec{p}_e = m_e \cdot \frac{d\vec{r}_e}{dt} = m_e \cdot \left( \frac{d\vec{R}}{dt} + \frac{m_p}{M} \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} \right)$$

Ao escrevermos a energia total em função dos momentos e do potencial, que depende apenas da distância entre as duas partículas, iremos obtê-la em termos de  $M$ ,  $\vec{R}$  e  $\vec{r}$  (ver Apêndice B),

$$E = \frac{M}{2} \cdot \left( \frac{d\vec{R}}{dt} \right)^2 + \frac{\mu}{2} \cdot \left( \frac{d\vec{r}}{dt} \right)^2 + V(\vec{r}) \quad \mu = \frac{m_p \cdot m_e}{m_p + m_e}$$

Com isso temos que a energia total, agora escrita em termos do momento, é

$$E = \frac{\vec{p}_R^2}{2 \cdot M} + \frac{\vec{p}_r^2}{2 \cdot \mu} + V(\vec{r})$$



Utilizando a equação (5), mas considerando um sistema de duas partículas, ou seja, três dimensões e o resultado da energia obtido até então, temos que a equação de Schrödinger independente do tempo fica da seguinte forma,

$$\left[ \frac{\vec{p}_R^2}{2 \cdot M} + \frac{\vec{p}_r^2}{2 \cdot \mu} + V(\vec{r}) \right] \cdot f(\vec{R}, \vec{r}) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2 \cdot M} \cdot \vec{\nabla}_R^2 - \frac{\hbar^2}{2 \cdot \mu} \cdot \vec{\nabla}_r^2 + V(\vec{r}) \right] \cdot f(\vec{R}, \vec{r}) = E \cdot f(\vec{R}, \vec{r})$$

Aplicando o método da separação de variáveis, considerando uma função de  $\vec{R}$  e outra de  $\vec{r}$ ,

$$f(\vec{R}, \vec{r}) = \chi(\vec{R}) \cdot \psi(\vec{r})$$

Obtemos duas novas equações, uma para o movimento de translação da partícula livre de massa  $M$  e outra para a partícula de massa  $\mu$  com potencial  $V(\vec{r})$ . Como estamos interessados em um sistema com um elétron ligado a um núcleo carregado positivamente, resolvemos a segunda equação.

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2 \cdot \mu} \cdot \nabla^2 + \hat{V}(r) \right] \cdot \psi(\vec{r}) = E \cdot \psi(\vec{r})$$

Conforme dito anteriormente, esse é um sistema em três dimensões, então utilizamos coordenadas esféricas,

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot \mu} \cdot \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \cdot \left( \frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \cdot \left( \sin \theta \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right] \cdot \psi + \hat{V}(r) \cdot \psi = E \cdot \psi$$

Aqui surgem os ângulos  $\theta$  e  $\phi$ , para simplificar utilizamos o operador do momento angular  $\hat{L}$ , através da seguinte relação<sup>3</sup>,

$$\frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \cdot \left( \sin \theta \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} = -\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2}$$

Então, substituindo esta relação na equação e rearranjando-a, obtemos,

<sup>3</sup> De acordo com Griffiths (2011, p.127),  $L^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \cdot \left( \sin \theta \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$ .

$$\left[ r^2 \cdot \frac{\partial^2}{\partial r^2} + 2 \cdot r \cdot \frac{\partial}{\partial r} + \frac{2 \cdot \mu \cdot r^2}{\hbar^2} \cdot (E - \hat{V}(r)) \right] \cdot \psi(r, \theta, \phi) = \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} \cdot \psi(r, \theta, \phi)$$

Através do método de separação de variáveis com  $\psi(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot Y(\theta, \phi)$ , saímos de uma equação diferencial parcial e chegamos a duas equações ordinárias, de um lado ocorre a dependência apenas de  $r$ , enquanto do outro apenas dos ângulos  $\theta$  e  $\phi$ .

$$\frac{r^2}{R(r)} \cdot \frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2 \cdot r}{R(r)} \cdot \frac{dR(r)}{dr} + \frac{2 \cdot \mu \cdot r^2}{\hbar^2} \cdot (E - \hat{V}(r)) = \frac{1}{Y(\theta, \phi)} \cdot \frac{\hat{L}^2 \cdot Y(\theta, \phi)}{\hbar^2}$$

Temos de um lado da equação a dependência apenas de  $r$ , e do outro, de  $\theta$  e  $\phi$ , concluindo que os dois lados são iguais à mesma constante. Essa constante é  $l \cdot (l + 1)$ , sendo  $l$  um número inteiro. (GRIFFITHS, 2011, p.102)

Como estamos interessados na equação radial, focamos apenas na parte esquerda da equação,

$$\frac{r^2}{R(r)} \cdot \frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2 \cdot r}{R(r)} \cdot \frac{dR(r)}{dr} + \frac{2 \cdot \mu \cdot r^2}{\hbar^2} \cdot (E - \hat{V}(r)) = l \cdot (l + 1)$$

Após reorganizar a equação e substituímos o potencial coulombiano em  $\hat{V}(r)$  para o caso do hidrogênio, chegamos à equação radial,

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2 \cdot \mu} \cdot \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2}{2 \cdot \mu} \cdot \frac{l \cdot (l + 1)}{r^2} - \frac{q_e^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r} \right] \cdot R(r) = E \cdot R(r)$$

A qual deve ser resolvida para a obtenção da função de onda radial do átomo de hidrogênio. Essa função normalizada é  $R_{nl}(r) = \left[ \alpha^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-\alpha r} (\alpha r)^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\alpha r)$ , com  $\alpha = \frac{2Z}{na_0} = \frac{2Zme^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}$ . (ARFKEN, 2017, p. 701)

### 2.3 CRIAÇÃO DO ALGORITMO PARA A FUNÇÃO DE ONDA RADIAL DO HIDROGÊNIO

Utilizando o ambiente de programação do Scilab, podemos criar um algoritmo, baseado nos resultados anteriores, que forneça a função de onda radial do hidrogênio através da entrada das variáveis inteiras  $n$  e  $l$ , conforme Lisbôa (2020),

O número quântico principal  $n$  está associado aos níveis de energia, que são quantizados e podem dispor de valores  $= 1, 2, 3, \dots$ . O número quântico azimutal  $l$  está associado à orientação das órbitas, e seus valores variam de,  $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ . (LISBÔA, 2020, p. 255)

Antes de iniciar a criação do algoritmo, que pode ser consultado no Apêndice C, a função de onda radial apresentada anteriormente será alterada algebricamente para melhor adequação ao algoritmo e melhor visualização no console do Scilab, agrupando  $\frac{2 \cdot r}{n \cdot a_0}$  em uma letra auxiliar  $s$ , passando a ser,

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{n \cdot a_0}\right)^3 \cdot \frac{(n-l-1)!}{2 \cdot n \cdot (n+l)!}} \cdot L_{n-l-1}^{2 \cdot l+1}(s) \cdot s^l \cdot e^{-\frac{s}{2}} \quad s = \frac{2 \cdot r}{n \cdot a_0}$$

Como a função de onda é um produto entre quatro termos, podemos criar comandos separados para cada termo, nomeando-os da seguinte maneira,

$$A_{nl} = \sqrt{\left(\frac{2}{n \cdot a_0}\right)^3 \cdot \frac{(n-l-1)!}{2 \cdot n \cdot (n+l)!}} \quad B_{nl} = L_{n-l-1}^{2 \cdot l+1}(s)$$

$$C_{nl} = s^l \quad D_n = e^{-\frac{s}{2}}$$

### 2.3.1 Comando para as entradas

O algoritmo recebe duas variáveis nomeadas como  $n$  e  $l$ , então faz os cálculos para obter os resultados que serão usados no decorrer das linhas de comando (linhas 4-10).

### 2.3.2 Comando para o termo $A_{nl}$

O primeiro termo é referente à parte constante da função, possui dois cálculos de fatoriais, duas frações, com uma delas elevada ao cubo, algumas multiplicações, uma adição e subtração, tudo envolto por uma raiz quadrada. Para o cálculo dos fatoriais (linhas 14-34) usa-se o comando de repetição, while, e por ter frações é interessante fazer o algoritmo simplifica-las, um mínimo possível, usando o comando modulo(m,n) dentro de um if-else para sua exibição (linhas 90-94).

### 2.3.3 Comando para o termo $B_{nl}$

O segundo termo (linhas 38-86) é chamado de polinômio associado de Laguerre, suas características (coeficientes e grau) dependem de  $n$  e  $l$ . Para obtê-lo utiliza-se a forma explícita dos polinômios associados de Laguerre,  $L_n^k(x) = \sum_{m=0}^n (-1)^m \cdot \frac{(n+k)!}{(n-m)! \cdot (k+m)! \cdot m!} \cdot x^m$ ,  $k \geq 0$ . (ARFKEN, 2017, p. 696)

Para o algoritmo, as letras são alteradas, começando por  $n$  que passa a ser  $f = n - l - 1$  e  $k$  passa a ser  $f1 = 2 \cdot l + 1$ . As demais variáveis criadas são para auxílio no decorrer das linhas de programação. A variável do polinômio será alterada para  $s$ .

Aqui é utilizado o comando de loop for indo de  $i = 0$  até  $f$  e finalizado com a expressão da linha 85 para o somatório.

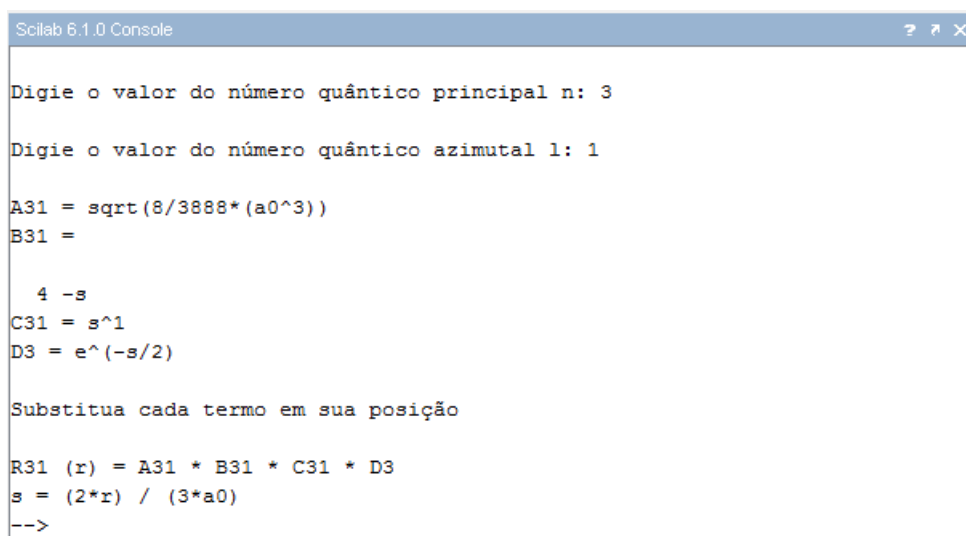
### 2.3.4 Comando para os termos $C_{nl}$ e $D_n$

Os dois últimos termos são os mais simples por se tratarem de expoentes,  $C_{nl}$  é um monômio (linha 105),  $s$  elevado a  $l$ , e  $D_n$  é um exponencial (linha 111),  $e$  elevado a  $-\frac{s}{2}$ .

### 2.3.5 Teste do algoritmo

Para um teste do algoritmo, entramos com  $n = 3$  e  $l = 1$ , com o programa nos retornando,

**Figura 2 – Console do Scilab com o teste**



```

Scilab 6.1.0 Console
Digie o valor do número quântico principal n: 3
Digie o valor do número quântico azimutal l: 1
A31 = sqrt(8/3888*(a0^3))
B31 =
    4 -s
C31 = s^1
D3 = e^(-s/2)
Substitua cada termo em sua posição
R31 (r) = A31 * B31 * C31 * D3
s = (2*r) / (3*a0)
-->

```

Fonte: Scilab

Substituindo cada parte em sua devida posição, como orientado na legenda na parte mais abaixo da tela do console, e transcrevendo a função de onda da seguinte forma, obtemos,

$$R_{31}(r) = \sqrt{\frac{8}{3888 \cdot a_0^3}} \cdot \left(4 - \frac{2 \cdot r}{3 \cdot a_0}\right) \cdot \left(\frac{2 \cdot r}{3 \cdot a_0}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3 \cdot a_0}}$$

A partir do resultado dado podemos manualmente simplificar e obter,

$$R_{31}(r) = \frac{8}{27 \cdot \sqrt{6}} \cdot \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \left(1 - \frac{r}{6 \cdot a_0}\right) \cdot \frac{r}{a_0} \cdot e^{-\frac{r}{3 \cdot a_0}}$$

## 2.4 METODOLOGIA

Para atingir os objetivos no decorrer do artigo, a metodologia aplicada foi a pesquisa bibliográfica, pois utilizou-se de material escrito já elaborado como base de fundamentação (GIL apud MATIAS-PEREIRA, 2019, p. 90). Os materiais utilizados são físicos e digitais, com predominância de livros digitais, de matemática e física, de edições com data de publicação recente. Para a pesquisa dos livros foi utilizado palavras-chave como equação de Schrödinger, função de onda do hidrogênio e polinômios associados de Laguerre. Após a obtenção e avaliação dos livros foram iniciados os procedimentos para a criação do algoritmo, a primeira ação foi o entendimento da equação de Schrödinger completa e da equação independente do tempo para então aplica-la ao átomo de hidrogênio. Após a obtenção da função de onda do hidrogênio através da bibliografia, foi criado o algoritmo utilizando a linguagem de programação do Scilab.

### 3 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este artigo apresentou um algoritmo para obtenção da parte radial da função de onda do hidrogênio no Scilab, porém não fornecendo a forma mais simplificada, tendo a necessidade da simplificação manual. Para obtê-lo foi apresentada a equação de Schrödinger dependente do tempo e sua resolução, através do método da separação de variáveis, para obter a equação independente do tempo, com a qual pôde ser aplicado o sistema próton-elétron do átomo de hidrogênio para a obtenção da equação radial, que nos dá a função de onda radial. O foco do artigo foi o trabalho matemático em cima dos conceitos e cálculos apresentados e não uma explicação ou interpretação física dos conceitos principalmente sobre a função de onda. Com a função de onda radial obtida, criamos um algoritmo no ambiente de programação do Scilab, usando os comandos disponíveis na referida linguagem de programação, separando a expressão que forma a função em quatro partes e criando um bloco de comandos para cada parte. Destaca-se o bloco de comandos para a obtenção dos polinômios associados de Laguerre, utilizando sua forma explícita, através do comando de seleção if-else e dos comandos de repetição while e for para o cálculo dos fatoriais e do somatório. Por fim foi apresentado um teste para a visualização do algoritmo em funcionamento no console do Scilab fornecendo um resultado não simplificado, no entanto existem várias formas de simplificá-la manualmente deixando ao usuário obter a forma que mais lhe seja útil. Todos os cálculos, a função de onda radial do hidrogênio e a forma explícita dos polinômios associados de Laguerre estão fundamentados em livros de matemática e física, com alguns cálculos desenvolvidos algebricamente para melhor entendimento de onde surgiram determinados resultados. O algoritmo é feito apenas com comandos básicos do Scilab, porém requer muita atenção nos comandos de repetições e nas variáveis auxiliares, pois são linhas de comando no interior de outras linhas de comando.

## REFERÊNCIAS

ARFKEN, G. **Física Matemática – Métodos Matemáticos para Engenharia e Física**. Rio de Janeiro: Grupo GEN, 2017. 9788595152618. Disponível em: <https://integrada.minhabiblioteca.com.br/#/books/9788595152618/>. Acesso em: 17 jun. 2021.

GRIFFITHS, David J. **Mecânica Quântica**. 2. ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2011.

HALLIDAY, David. **Fundamentos de Física: Óptica e Física Moderna**. 10. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2016.

LISBÔA, Adriana do Rocio Lopes Steklain. **Introdução à Mecânica Quântica**. 1. ed. Curitiba: InterSaberes, 2020.

MATIAS-PEREIRA, José. **Manual de Metodologia da Pesquisa Científica**. 4. São Paulo: Grupo GEN, 2016. 9788597008821. Disponível em: <https://integrada.minhabiblioteca.com.br/#/books/9788597008821/>. Acesso em: 17 jun. 2021.

RUZZI, Maurizio. **Física Moderna: Teorias e Fenômenos**. 2. ed. ver. e atual. Curitiba: InterSaberes, 2012. – (Metodologia do Ensino de Matemática e Física; v. 8).

### APÊNDICE A – $\vec{r}_p$ e $\vec{r}_e$ em termos de $M$ , $\vec{R}$ e $\vec{r}$

Para  $\vec{r}_p$ :

Isola-se  $\vec{r}_e$  da equação 6 e o substitui na equação 8,

$$\vec{R} = \frac{m_p \cdot \vec{r}_p + m_e \cdot (\vec{r}_p + \vec{r})}{M}$$



$$\vec{R} = \frac{m_p \cdot \vec{r}_p + m_e \cdot \vec{r}_p + m_e \cdot \vec{r}}{M}$$

$$\vec{R} = \frac{\vec{r}_p \cdot \overbrace{(m_p + m_e)}^M + m_e \cdot \vec{r}}{M}$$

$$\vec{R} = \vec{r}_p + \frac{m_e \cdot \vec{r}}{M}$$

Da nova equação isola-se  $\vec{r}_p$ ,

$$\vec{r}_p = \vec{R} - \frac{m_e \cdot \vec{r}}{M}$$

Para  $\vec{r}_e$ :

Isola-se  $\vec{r}_p$  da equação 6 e o substitui na equação 8,

$$\vec{R} = \frac{m_p \cdot (\vec{r}_e - \vec{r}) + m_e \cdot \vec{r}_e}{M}$$

$$\vec{R} = \frac{m_p \cdot \vec{r}_e - m_p \cdot \vec{r} + m_e \cdot \vec{r}_e}{M}$$

$$\vec{R} = \frac{\vec{r}_e \cdot \overbrace{(m_p + m_e)}^M - m_p \cdot \vec{r}}{M}$$

$$\vec{R} = \vec{r}_e - \frac{m_p \cdot \vec{r}}{M}$$

Da nova equação isola-se  $\vec{r}_e$ ,

$$\vec{r}_e = \vec{R} + \frac{m_p \cdot \vec{r}}{M}$$

## APÊNDICE B – Energia total em termos de $M$ , $\vec{R}$ e $\vec{r}$

Para a energia total temos:

$$E = \frac{\vec{p}_p^2}{2 \cdot m_p} + \frac{\vec{p}_e^2}{2 \cdot m_e} + V(\vec{r})$$

Substituindo  $\vec{p}_p$ ,  $\vec{p}_e$  e desenvolvendo a equação algebricamente,

$$E = \frac{\left[ m_p \cdot \left( \frac{d\vec{R}}{dt} - \frac{m_e}{M} \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} \right) \right]^2}{2 \cdot m_p} + \frac{\left[ m_e \cdot \left( \frac{d\vec{R}}{dt} - \frac{m_p}{M} \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} \right) \right]^2}{2 \cdot m_e} + V(\vec{r})$$

$$E = \frac{m_p \cdot \left( \frac{d\vec{R}}{dt} - \frac{m_e}{M} \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} \right)^2}{2} + \frac{m_e \cdot \left( \frac{d\vec{R}}{dt} - \frac{m_p}{M} \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} \right)^2}{2} + V(\vec{r})$$

$$E = \frac{m_p}{2} \cdot \left[ \left( \frac{d\vec{R}}{dt} \right)^2 - 2 \cdot \frac{d\vec{R}}{dt} \cdot \frac{m_e}{M} \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} + \frac{m_e^2}{M^2} \cdot \left( \frac{d\vec{r}}{dt} \right)^2 \right] +$$

$$\frac{m_e}{2} \cdot \left[ \left( \frac{d\vec{R}}{dt} \right)^2 + 2 \cdot \frac{d\vec{R}}{dt} \cdot \frac{m_p}{M} \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} + \frac{m_p^2}{M^2} \cdot \left( \frac{d\vec{r}}{dt} \right)^2 \right] + V(\vec{r})$$

$$E = \frac{1}{2} \cdot \left[ \left( \frac{d\vec{R}}{dt} \right)^2 \cdot m_p + \left( \frac{d\vec{R}}{dt} \right)^2 \cdot m_e + \frac{m_e^2 \cdot m_p}{M^2} \cdot \left( \frac{d\vec{r}}{dt} \right)^2 + \frac{m_p^2 \cdot m_e}{M^2} \cdot \left( \frac{d\vec{r}}{dt} \right)^2 \right] + V(\vec{r})$$

$$E = \frac{1}{2} \cdot \left[ \left( \frac{d\vec{R}}{dt} \right)^2 \cdot \overbrace{(m_p + m_e)}^M + \left( \frac{d\vec{r}}{dt} \right)^2 \cdot \left( \frac{m_e^2 \cdot m_p}{M^2} + \frac{m_p^2 \cdot m_e}{M^2} \right) \right] + V(\vec{r})$$

$$E = \frac{1}{2} \cdot \left[ \left( \frac{d\vec{R}}{dt} \right)^2 \cdot M + \left( \frac{d\vec{r}}{dt} \right)^2 \cdot \left( \frac{m_p \cdot m_e \cdot \overbrace{(m_p + m_e)}^M}{M^2} \right) \right] + V(\vec{r})$$

$$E = \frac{1}{2} \cdot \left[ \left( \frac{d\vec{R}}{dt} \right)^2 \cdot M + \left( \frac{d\vec{r}}{dt} \right)^2 \cdot \left( \frac{m_p \cdot m_e}{M} \right) \right] + V(\vec{r})$$

$$E = \frac{1}{2} \cdot \left[ \left( \frac{d\vec{R}}{dt} \right)^2 \cdot M + \left( \frac{d\vec{r}}{dt} \right)^2 \cdot \mu \right] + V(\vec{r})$$

$$\boxed{E = \frac{M}{2} \cdot \left( \frac{d\vec{R}}{dt} \right)^2 + \frac{\mu}{2} \cdot \left( \frac{d\vec{r}}{dt} \right)^2 + V(\vec{r})}$$

**APÊNDICE C** – Algoritmo completo

```

0001 clc;
0002 clear;
0003
0004 n=input("Digie o valor do número quântico principal n: ")
0005 l=input("Digie o valor do número quântico azimutal l: ")
0006
0007 b=n-l-1
0008 c=n+l
0009 fatorialb=1
0010 fatorialc=1
0011
0012 // PARTE CONSTANTE - TERMO Anl
0013
0014 if b == 0 || b == 1 then
0015     fatorialb=1;
0016 else
0017     while b > 1
0018         fatorialb=fatorialb*b;
0019         b=b-1;
0020     end
0021 end
0022
0023 if c == 0 || c == 1 then
0024     fatorialc=1
0025 else
0026     while c > 1
0027         fatorialc=fatorialc*c;
0028         c=c-1;
0029     end
0030 end
0031
0032 d=2*n*fatorialc
0033 e=8/(n)^3
0034 f3=fatorialb/d
0035
0036 // POLINÔMIO ASSOCIADO DE LAGUERRE - TERMO Bnl
0037
0038 f=n-l-1
0039 f1=(2*f)+1
0040 f2=f+f1
0041 s=%s
0042 fatorialf2=1
0043 L=0
0044
0045 if f2 == 0 || f2 == 1 then
0046     fatorialf2=1
0047 else
0048     while f2 > 1
0049         fatorialf2=fatorialf2*f2;
0050         f2=f2-1;
0051     end
0052 end
0053
0054 for i=0:f,
0055     g=f-i
0056     fatorialg=1;
0057     if g==0 || g==1 then

```

```

0058     fatorialg=1
0059 else
0060     while g > 1
0061         fatorialg = fatorialg*g;
0062         g=g-1;
0063     end
0064 end
0065 h=f1+i
0066 fatorialh=1;
0067 if h==0 || h==1 then
0068     fatorialh=1
0069 else
0070     while h > 1
0071         fatorialh = fatorialh*h;
0072         h=h-1;
0073     end
0074 end
0075 j=i
0076 fatorialj=1;
0077 if j == 0 || j == 1 then
0078     fatorialj=1;
0079 else
0080     while j > 1
0081         fatorialj=fatorialj*j;
0082         j=j-1;
0083     end
0084 end
0085     L=(((-1)^i)*((fatorialf2/(fatorialg*fatorialh*fatorialj))*s^i))+L
0086 end
0087
0088 // EXIBIÇÃO Anl
0089
0090 if modulo(8,n^3)==0 && modulo(fatorialb,d)==0 then
0091     mprintf("A%d%d = sqrt((1/a0^3)*%d)\ n",n,l,e*f3)
0092 else
0093     mprintf("A%d%d = sqrt(%d/%d*(a0^3))\ n",n,l,8*fatorialb,(n^3)*d)
0094 end
0095
0096 // EXIBIÇÃO Bnl
0097
0098 mprintf("B%d%d = \ n",n,l)
0099 (disp(L))
0100
0101 // EXIBIÇÃO Cnl
0102
0103 // MONÔMIO - TERMO Cnl
0104
0105 mprintf("C%d%d = s^%d\ n",n,l,l)
0106
0107 // EXIBIÇÃO Dn
0108
0109 // EXPONENCIAL - TERMO Dn
0110
0111 mprintf("D%d = e^(-s/2)\ n\ n",n)
0112
0113 // LEGENDA
0114 mprintf("Substitua cada termo em sua posição\ n\ n")

```

```
0115 mprintf("R%d%d (r) = A%d%d * B%d%d * C%d%d * D%d\n",n,l,n,l,n,l,n)
0116 mprintf("s = (2*r) / (%d*a0)",n)
```