



UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

INSTITUTO DE FÍSICA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

CÁLCULO DOS NÍVEIS DE ENERGIA DO ÁTOMO  
DE HIDROGÊNIO SOB A AÇÃO DE UM CAMPO  
MAGNÉTICO EXTERNO UTILIZANDO A EQUAÇÃO  
DE HAMILTON-JACOBI RELATIVÍSTICA

Gesiel Gomes Silva

2013



DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

CÁLCULO DOS NÍVEIS DE ENERGIA DO ÁTOMO  
DE HIDROGÊNIO SOB A AÇÃO DE UM CAMPO  
MAGNÉTICO EXTERNO UTILIZANDO A EQUAÇÃO  
DE HAMILTON-JACOBI RELATIVÍSTICA

Gesiel Gomes Silva

Dissertação de Mestrado apresentada ao  
Instituto de Física da Universidade de Brasília,  
como parte do requisito para obtenção do  
título de Mestre em Física.

**Orientador**

Prof. Dr. Antônio Luciano Almeida Fonseca



*“Acima de tudo: alcance a sabedoria.*

*Escreva no topo da lista: Entendimento.*

*Agarre-a com firmeza – acredite, você não se arrependerá.*

*Nunca a deixe partir, porque ela fará sua vida gloriosa,*

*Cheia da indescritível e maravilhosa graça,*

*Ela enfeitará seus dias com a mais pura beleza”.*

*(Provérbios 3:7-9)*

# Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus que é o único digno de toda honra, glória e louvor. Aquele que é o princípio e fim de todas as coisas.

A minha esposa Thabita pelo amor dedicado, pela confiança em todos os meus sonhos e projetos, pela compreensão nos momentos de ausência física ou mental, por acreditar e me incentivar sempre em continuar e ir além. Essa conquista também é sua.

Aos meus pais Lázaro e Ione pelos primeiros ensinamentos que refletem no que sou hoje. Pelo incentivo ao estudo como oportunidade de transformação da nossa realidade. Vocês tem parte em tudo que tenho conquistado.

Aos meus irmãos Franciele e Misael, a minha avó Catarina, meus sogros Denise e Paulo, minhas cunhadas e cunhados, meus tios e tias, meus primos e primas de sangue ou não e todos os meus amigos pelo apoio e carinho em diversos momentos.

Aos companheiros de IFG e UnB pelos momentos divididos ao longo desta caminhada, vocês foram importantes e parceiros diante às dificuldades.

Ao Prof. Dr. Daniel Lima Nascimento pelo apoio e pela importante contribuição no desenvolvimento deste trabalho.

Ao meu orientador Prof. Dr. Antonio Luciano Almeida Fonseca pela orientação, pela paciência, compreensão e confiança. Obrigado!

# Resumo

Nosso trabalho consistiu em encontrar os níveis de energia do átomo de hidrogênio sob a ação de um campo magnético externo constante. Utilizamos o formalismo de Hamilton-Jacobi relativístico para introduzir o campo magnético e para obter uma equação para o átomo de hidrogênio sob a ação de um campo magnético uniforme.

Propusemos também uma função, com base em uma expansão polinomial, como solução da equação obtida a partir do formalismo de Hamilton-Jacobi possibilitando assim a solução numérica do problema.

A simetria do nosso sistema muda com a intensidade do campo magnético: a simetria é esférica quando a intensidade do campo aproxima de zero e é cilíndrica quando tende a infinito. Essa função permitiu obter resultados nestes extremos sem a necessidade de alterações na sua forma, bem como, permitiu obter resultados para campos intermediários.

Utilizando o método variacional obtivemos um sistema de equações que nos permitiu obter os autovalores de energia. Os resultados obtidos concordam com os encontrados na literatura mostrando que o nosso método, ainda em evolução, é consistente.

# Abstract

In this work, we find the energy levels of the hydrogen atom submitted to an external constant magnetic field. It was used the relativistic formalism of Hamilton-Jacobi to introduce the magnetic field and to obtain an equation for the hydrogen atom under the action of a uniform magnetic field.

A function also was proposed, based on a polynomial expansion, as a solution of the equation obtained from the Hamilton-Jacobi formalism allowing the numerical solution of the problem.

The symmetry of the system changes with the intensity of the magnetic field: the symmetry is spherical when the field strength approaches zero and is cylindrical when the field strength tends to infinity. This function allowed results in these extremes without the need of changes in form but has also enabled us to obtain results for other intermediary fields.

Using the variational method it was possible to obtain a system of equations that has enabled us to obtain the eigenvalues of energy. The agreement of the results with other findings in the literature demonstrates that the method proposed here, still under development, is consistent with expected values.

# Sumário

<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Breve História do Efeito Zeeman</b>	<b>4</b>
<b>3 Diferentes abordagens: O Átomo de Hidrogênio Sujeito a Um Campo Magnético Externo</b>	<b>7</b>
3.1 Abordagens: visão qualitativa	7
3.2 Formulações e Métodos Consolidados	18
<b>4 Método e Equações</b>	<b>52</b>
<b>5 Resultados e Discussões</b>	<b>59</b>
<b>6 Conclusões e Perspectivas</b>	<b>65</b>
<b>Apêndice A – Programa: Cálculo dos níveis de energia</b>	<b>71</b>

# Lista de Tabelas

5.1	Energias do estado fundamental para o átomo de hidrogênio sujeito a um campo magnético uniforme com $\gamma = 0 - 8.0$ .	59
5.2	Energias do estado fundamental para o átomo de hidrogênio sujeito a um campo magnético uniforme com $\gamma = 10 - 10^5$ .	60
5.3	Energias para valores de $\gamma$ próximo de onde a energia passa a ser positiva.	61
5.4	Energias para diversos valores de $\gamma$ e diferentes valores e $n$ .	62

Constante	Símbolo	SI	u.a.
Velocidade da luz	$c$	$299792458 \text{ ms}^{-1}$	$\frac{1}{\alpha}$
Unidade de massa	$m_e$	$9,1093815 \times 10^{-31} \text{ kg}$	1
Unidade de tempo	$\frac{\hbar}{m_e c^2 \alpha^2}$	$1,28808866 \times 10^{-21} \text{ s}$	1
Unidade de comprimento	$a_0$	$5,291772108 \times 10^{-11} \text{ m}$	1
Unidade de carga	$e$	$1,60217653 \times 10^{-19} \text{ C}$	1
Unidade de energia (Ry)	$\frac{\alpha^2 m_e c^2}{2}$	$2,17985 \times 10^{-18} \text{ J}$	$\frac{1}{2}$
Unidade de campo magnético	$B_0 = \frac{\alpha^2 m_e^2 c^2}{e \hbar}$	$2,35 \times 10^5 \text{ T}$	1
Unidade de energia ( $E_h$ )	$\alpha^2 m_e c^2$	$4,3597 \times 10^{-18} \text{ J}$	1
Unidade de campo magnético	$B_0 = \frac{2\alpha^2 m_e^2 c^2}{e \hbar}$	$4,70 \times 10^5 \text{ T}$	2

Tabela: constantes fundamentais em unidades do sistema internacional (S.I.) e em unidades atômicas (u.a.). A constante de estrutura fina  $\alpha$  é igual a  $1/137,035999074(44)$ .

# Capítulo 1

## Introdução

O advento do estudo da absorção e emissão de radiação, mais difundido a partir de meados do século XIX, e que ficaria conhecido como espectroscopia, trouxe grandes contribuições para investigação da natureza atômica da matéria, contribuições estas que seriam muito importantes para as ideias sobre esse tema que surgiriam no início do século XX.

O estudo sobre como a estrutura atômica e molecular da matéria interage com um campo magnético externo passa por uma técnica espectroscópica pois, o que foi observado por Zeeman [2], no que ficaria conhecido então como efeito Zeeman, é que a frequência emitida do espectro atômico sofreria alterações com a presença de um campo magnético externo. Entender como a matéria interage com campos magnéticos externos de diferentes intensidades tem implicações importantes na compreensão da própria constituição da matéria e também em outras áreas, como a astrofísica.

Em astrofísica, é importante interpretar o espectro de emissão dos corpos celestes para obter informações sobre eles. Neste sentido, a interação com o campo magnético e como ele altera este espectro é fundamental, já que estão presentes campos magnéticos bem intensos como, por exemplo, em anãs

brancas com intensidade variando de  $10^6$  a  $10^9$ G, estrelas de nêutrons onde os campos são da ordem de  $10^{12}$  a  $10^{13}$ G e também magnetares, que são estrelas de nêutrons com campos magnéticos ainda mais intensos, da ordem de  $10^{14}$  a  $10^{16}$ G. A descoberta destes campos intensos foi importante em renovar o interesse da investigação dos níveis de energia do átomo de hidrogênio em campos magnéticos muito intensos.

O comportamento do átomo de hidrogênio sob a ação de um campo magnético externo tem também aplicações importantes no estudo da física do estado sólido, em física do plasma, física de superfícies e na espectroscopia em geral, assim, a importância da investigação deste comportamento permeia diversas áreas e segmentos da pesquisa em física atômica e molecular. Compreender como os níveis de energia se alteram e como eles são desdobrados com a presença de um campo magnético externo é muito importante para compreensão da estrutura da matéria.

O efeito observado por Zeeman derivou desta necessidade de investigação do comportamento da matéria quando sujeita a campos magnéticos externos. A interpretação e compreensão deste efeito é essencial para determinar a estrutura fina da matéria, a estrutura hiperfina e a mudança observada por Lamb [2] em níveis que se acreditavam ter a mesma energia. Para tanto, é desejável um estudo do átomo de hidrogênio sobre a ação de um campo magnético externo justificando a importância da compreensão do efeito Zeeman.

Com o descobrimento deste efeito e com a necessidade do homem em entender o comportamento da matéria e sua constituição, tivemos no século XX diversas abordagens relativísticas e não-relativísticas que não se limitaram a campos magnéticos de baixa intensidade, onde esse efeito era observado, mas avançaram até campos de altíssima intensidade. Nos primeiros capítulos do nosso texto, serão enfatizados alguns métodos que se originaram da necessidade de encontrar soluções para estes sistemas, ou seja, o átomo de hidrogênio sob a ação de campos magnéticos externos de diferentes intensidades, principalmente através das equações de Schrödinger, de Klein-Gordon e de Dirac.

No nosso trabalho, estamos interessados em estudar como são alterados os níveis de energia sob a ação de um campo magnético externo. Além disso, estamos interessados inclusive em calcular os níveis de energia do átomo de hidrogênio para campos magnéticos de grande intensidade, como os encontrados no campo da astrofísica. Nosso ponto de partida é a equação de movimento obtida por Nascimento e Fonseca [1] a partir do formalismo de Hamilton-Jacobi. Nesse trabalho, não existia a presença de um campo magnético externo então devemos obter uma nova equação de movimento com base na equação de Hamilton-Jacobi relativística.

No capítulo 2 temos um breve histórico do efeito Zeeman que está intimamente ligado com os propósitos deste trabalho. No capítulo 3 apresentamos diversos métodos e equações presentes na literatura para solução do problema proposto. No capítulo 4 apresentamos nosso método mostrando que nossa formulação é simples e eficiente. No capítulo 5 apresentamos nossos resultados comparando-os com os de diversos outros autores presentes na literatura e no capítulo 6 as conclusões com relação a este trabalho e os apontamentos de como expandir nosso método melhorando ainda mais os resultados obtidos.

## Capítulo 2

### Breve História do Efeito Zeeman

O físico Pieter Zeeman, objetivando investigar qual o efeito de um campo magnético sobre a luz, reproduziu os experimentos que Faraday havia feito quando investigou o efeito de um campo magnético intenso sobre o espectro da chama de uma vela. Zeeman, então assistente de Lorentz, utilizou redes de difração de Rowland com grande poder de resolução para época e campos magnéticos de intensidade da ordem de  $10^4\text{G}$  [2].

Faraday não havia sido capaz de encontrar qualquer efeito com os recursos a sua disposição. Maxwell escreveu no esboço da biografia de Faraday na enciclopédia Britânica:

*“Ele (Faraday) esforçou-se, mas em vão, para detectar qualquer mudança nas linhas do espectro de uma chama quando a chama estava sujeitada a um ímã poderoso.”*

Mas, em 1896, Zeeman conseguiu observar o alargamento das raias espectrais do vapor de sódio. Os resultados de Zeeman foram suficientes para determinar a razão carga-massa da partícula que hoje chamamos de elétron com surpreendente proximidade aos valores atuais [2].

Já em 1897 ele observou o desdobramento da linha azul do espectro atômico do cádmio em várias outras linhas mais finas devido à presença de um campo magnético externo o que mostra que Zeeman tinha razão em querer refazer os experimentos de Faraday.

Para tanto, Zeeman colocou uma chama de Bunsen contendo sal comum entre os polos de um eletroímã e focando a luz na fenda de seu espectrômetro, organizando a chama de forma que as D-linhas fossem bem definidas, observou que as linhas se alargavam na presença de um campo magnético intenso [3]. Através de uma série de experiências controladas e devidamente apuradas, mostrou que o aumento foi devido diretamente à ação do campo e não devido a um efeito secundário, como poderia ser causado por exemplo devido a alterações na densidade da chama, variações de temperatura ou qualquer outro fator que não fosse a ação do campo magnético.

Zeeman observou que a frequência da luz emitida no espectro atômico é alterada quando sujeita a um campo magnético externo. Com isso ele comprovou experimentalmente que Maxwell estava equivocado em seu comentário, ou seja, a frequência de oscilação das partículas atômicas pode sim ser alterada quando estas partículas estão sujeitas a campos magnéticos externos.

A primeira teoria clássica a explicar o fenômeno observado por Zeeman foi desenvolvida por Lorentz amigo e mestre de Zeeman. O referido trabalho obteve sucesso e ambos dividiram o prêmio Nobel de Física em 1902 devido à descoberta e formulação de uma teoria para o efeito Zeeman onde o campo magnético interage com o momento angular orbital e o estado de energia é separado em  $(2l + 1)$  níveis para átomos com spin nulo, onde  $l$  é o número quântico azimutal. Tais previsões, porém, não seriam suficientes para explicar o efeito Zeeman anômalo, onde as raias do espectro atômico de um átomo com spin não nulo são desdobradas em mais linhas espectrais na presença de um campo magnético externo.

O efeito Zeeman passaria a ser usado como método para elucidar a estrutura atômica fina da matéria [2], seria também determinante para que Pauli estabelecesse o princípio de exclusão e igualmente importante para a

compreensão do Spin do elétron e sua relação com a constituição da matéria no que é chamado de efeito Zeeman anômalo, efeito este que demonstra a quantização espacial do spin eletrônico. A terminologia anômalo foi dada bem antes que a teoria quântica fornecesse uma compreensão dos desdobramentos Zeeman dos níveis de energia.

O efeito Zeeman pode ser entendido como os efeitos de um campo magnético externo sobre o espectro atômico, ou seja, na presença de um campo magnético externo como os níveis de energia são deslocados, o efeito Zeeman consiste então na separação e deslocamento de níveis discretos de energia sob a influência de um campo magnético externo.

Com o desenvolvimento da Mecânica Quântica e da Relatividade Especial seria possível uma melhor formulação para o efeito Zeeman anômalo, seja através da equação de Schrödinger em abordagens não-relativísticas ou da equação de Dirac em abordagens relativísticas. No entanto, outras formulações tem sido desenvolvidas para o entendimento deste efeito e para o estudo da interação da matéria com campos magnéticos de diferentes intensidades.

## Capítulo 3

# Diferentes Abordagens: O Átomo de Hidrogênio Sujeito a Um Campo Magnético Externo

Buscando resolver o átomo de hidrogênio sob a ação de um campo magnético externo e encontrar as energias, muitos autores desenvolveram seus métodos com base em duas importantes formulações, quais sejam, por meio da equação de Schrödinger ou da equação de Dirac. Nas duas próximas seções destacamos alguns trabalhos desenvolvidos principalmente com base nestas duas teorias. Posteriormente, os resultados obtidos nesses trabalhos servirão de parâmetro e comparação para o nosso trabalho.

### 3.1 Abordagens: visão qualitativa

Nesta seção estamos interessados em contextualizar nosso problema a partir das diversas abordagens e suas respectivas conclusões encontradas na literatura. Na próxima seção apresentaremos de forma sucinta as equações e métodos utilizados ao longo das últimas décadas para que tenhamos um quadro

com diversas formulações e contribuições, tanto para o caso não relativístico bem como para o caso relativístico.

Partiremos do artigo apresentado por Simola e Virtamo [4] que merece destaque pois, ao contrário da maioria dos trabalhos anteriores que obtiveram bons resultados para os níveis de energia apenas para campos magnéticos de intensidade intermediárias ( $B < 10^{10}\text{G}$ ), desenvolveram neste trabalho um método que oferece a possibilidade de encontrar os níveis de energia do átomo de hidrogênio também para campos magnéticos de grande intensidade. Neste trabalho calcularam as energias apenas para o caso não relativístico, mas os métodos e resultados serviram de referência também para trabalhos relativísticos.

Para que obtivessem bons resultados, os autores desenvolveram seu método utilizando uma aproximação de campos finitos partindo do caso de campo infinito e uma base para a expansão dos autoestados para o caso extremo, ou seja, caso onde a simetria cilíndrica é dominante ( $B \rightarrow \infty$ ). Em campos magnéticos finitos, o acoplamento de diferentes orbitais através do potencial coulombiano torna-se sensível levando a um sistema de equações diferenciais acopladas. Conseguiram resultados numéricos com precisão e através da expansão proposta uma melhor compreensão do espectro dos estados ligados.

No problema, dependendo da intensidade do campo magnético e do campo de Coulomb teremos, simultaneamente, simetria esférica e simetria cilíndrica. Simola e Virtamo consideraram o caso de campo magnético muito intenso, onde a simetria cilíndrica é dominante e a função de onda pode então ser escrita aproximadamente como um produto simples

$$\Psi(r) = \phi(r_{\perp})\psi(z)$$

onde  $\phi(r_{\perp})$  descreve o movimento transversal do elétron em relação a direção do campo magnético e  $\psi(z)$  o movimento longitudinal.

Os autoestados são caracterizados por três números quânticos  $n, m$  e  $k$ . Para o estado fundamental de Landau ( $n = 0$ ), a dependência de  $m$  enfraquece com o aumento da intensidade do campo  $B$  e no limite, com  $B \rightarrow \infty$ , o espectro se torna completamente degenerado com relação ao número quântico  $m$ .

Lindgrent e Virtamo [5] apresentam um método para o cálculo das energias do átomo de hidrogênio relativístico em campos magnéticos intensos baseando na expansão do espinor em termos dos orbitais de Landau. Com essa expansão, a equação de Dirac é transformada em um conjunto de infinitas equações diferenciais acopladas. O que eles [5] fizeram foi tratar nos limites, quando a constante de estrutura fina tende a zero e quando o campo magnético tende para infinito. Neste caso,  $B \rightarrow \infty$ , as infinitas equações ficariam reduzidas a quatro equações, onde cada uma estaria relacionada a uma componente do espinor. Utilizando uma aproximação adiabática, que também fora usada por Simola e Virtamo [4], conseguiram resultados numéricos com boa precisão, que aumentava proporcionalmente com a intensidade do campo.

Os estados são rotulados pelo número quântico de Landau  $n$  onde o número de elétrons por nível é diretamente proporcional à intensidade do campo magnético, pela componente  $z$  do momento angular total, pelo número de onda longitudinal  $k$  e pelo número quântico  $s$ , equivalente ao número quântico de spin quando não existe campo aplicado.

Os estados do átomo de hidrogênio, sujeito a um campo magnético de grande intensidade, são infinitamente degenerados com relação à componente  $z$  do momento angular. Neste sentido, Patil [6] calculou no seu trabalho as correções com base nas energias de ligação que pudessem remover a degenerescência dos estados pares e ímpares em relação ao número quântico principal e também a degenerescência provocada em relação ao número quântico magnético para os estados ímpares. Com isso, obtiveram também informações para conhecer melhor a estrutura dos níveis de energia do átomo de hidrogênio em campos magnéticos de grande intensidade.

O trabalho [6] tem motivações em astrofísica, pretendendo entender como é a interação com o campo magnético presente nas estrelas, no caso de campo de grande intensidade e finito, o que fica evidente é a importância em compreender a relação da interação da matéria com campos magnéticos para estudar os fenômenos em astrofísica. Conseguiram obter expressões para

energia dos estados pares e ímpares que fornecem valores com boa precisão em relação ao que já era conhecido.

Marko Robnik e Eberhard Schrüfer [7], usando um método de quantização desenvolvido por Robnik e partindo do Hamiltoniano clássico, obtiveram uma expansão de potências que seria equivalente a uma integral de movimento dependente do campo magnético. Trataram o Hamiltoniano como um oscilador harmônico bidimensional e, resolvendo em relação à energia, encontraram uma expansão que fornece os níveis de energia do átomo de hidrogênio em função do campo magnético.

No trabalho de S. P. Goldman e Zonghua Chen [8], diante da necessidade de calcular com precisão correções relativísticas para o átomo de hidrogênio sob ação de um campo magnético arbitrário, utilizaram um conjunto de bases que incorporam funções de Slater e Landau para que conseguissem soluções exatas da equação de Dirac nos limites, campo magnético nulo ou com campo magnético muito intenso quando o elétron permanece ligado devido à interação com campo magnético. Essa estratégia permitiu que encontrassem as energias para os casos relativístico e não relativístico para campos magnéticos arbitrários.

Para campos magnéticos intensos, as excitações dos níveis de energia de Landau são bem maiores que o potencial coulombiano e, portanto, tem maior participação na energia do estado fundamental. A proposta foi obter através do método variacional, as soluções para Hamiltoniano que descreve o átomo de hidrogênio sujeito a um campo magnético arbitrário.

Com esse método conseguiram [8] resultados bem mais precisos dos que até então haviam sido encontrados mostrando a importância desta técnica em comparação com os resultados não relativísticos e com os métodos onde os efeitos relativísticos são considerados como perturbações. Os resultados obtidos coincidem para campos fracos e de média intensidade onde estes métodos perturbativos seriam aplicáveis.

O método variacional é bastante útil principalmente quando se quer encontrar as energias pra casos onde as soluções puramente analíticas não são possíveis. Um dos problemas é encontrar uma função tentativa que tenha

equilíbrio entre simplicidade e precisão nos resultados. Der-San Chuu e Yu-Kuo Lee [9] apresentam uma aproximação simples que combina o método variacional e também aproximações perturbativas para o caso de campos magnéticos de grande intensidade. Conseguiram assim bons resultados para campos magnéticos de até  $10^{10}\text{G}$  que abrangem o que pode ser obtido em laboratório experimental até campos de interesse em astrofísica.

Para encontrar as energias introduziram [9] um parâmetro  $\lambda$  no Hamiltoniano separando-o em quatro partes sendo três com solução exata: átomo de hidrogênio em uma dimensão, oscilador harmônico em duas dimensões e operador da componente  $z$  do momento angular. A quarta parte, que possui um parâmetro desconhecido que é independente do campo magnético, foi resolvido utilizando a teoria da perturbação. O parâmetro  $\lambda$  é encontrado usando uma expansão da perturbação ou também utilizando um método variacional que minimize a energia total  $E_{nlm}(\lambda)$ .

Os resultados encontrados por Der-San Chuu e Yu-Kuo Lee se mostraram precisos em comparação com os resultados de trabalhos precedentes o que mostrou a validade do método para campos magnéticos dentro da gama de valores considerada. Os próprios autores discutem porém, que para campos magnéticos muito intensos  $B > 10^{10}\text{G}$  o método utilizado não apresentaria bons resultados.

O trabalho de Jang-Haur Wang e Chen-Shiung Hsue [10] apresenta uma coleção de resultados de vários métodos para o átomo de hidrogênio não relativístico. Eles calcularam a energia para o átomo de hidrogênio para diferentes valores de campo magnético buscando uma melhor acurácia, principalmente para valores de campo magnético onde os métodos anteriores apresentavam deficiência. Para tanto utilizaram um modelo de funções  $B$  – *splines* [10, 23, 24] e coordenadas cilíndricas com o método variacional. A utilização de coordenadas cilíndricas se justifica pelo fato da simetria deixar de ser esférica e passar a ser cilíndrica quando  $B \rightarrow \infty$  que é também uma região de interesse do nosso trabalho. Além do estado fundamental calcularam os níveis de energia para os estados de mais baixa energia 1s a 4f com  $m = 0$ .

As vantagens na utilização das funções *B-splines* estão na simplicidade e na flexibilidade, já que as *B-splines* são sequências de polinômios completamente determinados e sua flexibilidade permite uma fácil adequação às situações físicas específicas que por ventura possam ser abordadas. Na próxima seção apresentaremos como estas funções foram utilizadas por Wang e Hsue.

Rutkowski e Koslowski [11] afirmam em seu trabalho que para o cálculo de correções relativísticas de ordem superior não basta separar o Hamiltoniano relativístico em duas partes, ou seja, a parte não relativística e uma perturbação relativa à parte relativística. Então, naquela trabalho utilizaram o formalismo da Teoria de Perturbação Direta (DPT – Direct Perturbation Theory) para o átomo de hidrogênio relativístico sob a ação de um campo magnético constante, partindo da solução exata da equação de Schrödinger para um elétron em um campo estático de Coulomb. Os efeitos relativísticos são incluídos como uma primeira perturbação dentro da ideia da DPT e a interação com o campo magnético como uma segunda perturbação, introduzidos pelos respectivos parâmetros  $\lambda = Z^2/c^2$  e  $\eta = B/z^2$ .

Vilalba e Pino [12] apresentaram, um estudo relativístico sobre o átomo de hidrogênio bidimensional desconsiderando o spin do elétron na presença de um campo magnético homogêneo e também apresentaram soluções para o caso não relativístico considerando o spin. Para o primeiro caso, calcularam as energias para diferentes intensidades de campo magnético. As soluções para esse caso foram obtidas analiticamente através da equação de Klein-Gordon 2D, obtiveram uma relação que fornece a energia relativística para valores particulares de  $m$  e de intensidade do campo magnético.

Concluíram, para o segundo caso, a partir da equação de Schrödinger-Pauli, que a inclusão do spin introduz uma mudança nos níveis de energia que é proporcional a intensidade do campo magnético.

Em outro trabalho, Vilalba e Pino [13] resolveram o átomo de hidrogênio relativístico bidimensional sujeito a um campo magnético constante utilizando também a equação de Klein-Gordon bidimensional. A importância deste sistema está na sua aplicação na física de semicondutores onde os efeitos relativísticos

passam a ter importância para campos magnéticos de grande intensidade. Essa aproximação é importante pois permite a comparação direta entre o espectro relativístico e o não relativístico. Utilizaram também a equação de Dirac mostrando que para um limite de intensidade do campo magnético esta seria equivalente à equação radial de Klein-Gordon.

Utilizando o método variacional com a base do átomo de hidrogênio ou a base do oscilador Vilalba e Pino não obtiveram valores acurados para diferentes valores de campo magnético. A proposta foi então a utilização de um método variacional com bases mistas como uma combinação linear das duas bases e que fosse válida para qualquer nível quântico  $n$ . Os valores de energia obtidos utilizando a equação de Klein-Gordon são muito bons em comparação com os obtidos através da equação de Dirac.

Robnik e Romanovski [14] estudaram o átomo de hidrogênio bidimensional sob a ação de um campo magnético de grande intensidade. Inicialmente, fizeram uma explanação mostrando que o sistema do átomo de hidrogênio tridimensional seria caótico e não integrável principalmente por causa das interações coulombianas. Então o foco do trabalho passou a ser o caso bidimensional que mostraram ser um sistema onde é possível uma separação de variáveis e também um problema integrável.

Para a caracterização do problema, Robnik e Romanovski descrevem a Lagrangeana e a Hamiltoniano do problema em coordenadas polares e, utilizando a regra de quantização canônica, obtiveram o operador Hamiltoniano e conseqüentemente, a equação de Schrödinger para o sistema em coordenadas polares, o que possibilitaria encontrar as energias para o estado fundamental e também para outros níveis superiores.

Para obter soluções exatas do problema, Robnik e Romanovski utilizaram o operador Hamiltoniano na base de Landau. Os autovalores obtidos são exatamente os níveis de Landau e todo espectro pode ser obtido através da diagonalização da matriz obtida utilizando esta base para qualquer ( $\gamma = B/B_0$ ) e qualquer número atômico  $Z$ .

Outra abordagem do problema por parte de Robnik e Romanovski [15] consistiu em escrever o Hamiltoniano na base de Coulomb que conhecida também como base do hidrogênio. O sistema é tratado como uma perturbação magnética em um problema de interação de Coulomb, o que não deixa de ser uma boa aproximação já que os valores de  $\gamma$  obtidos em laboratório são geralmente muito pequenos.

Uma estimativa da energia do estado fundamental foi obtida por Robnik e Romanovski utilizando o método do variacional para  $\gamma \ll 1$  e  $\gamma \gg 1$  que fornecem bons resultados comparados com os métodos utilizando perturbação por exemplo. Outro método utilizado, foi o de uma função do mínimo do potencial o qual os permitiu calcular a energia do estado fundamental analiticamente, menos para o caso em  $\gamma \gg 1$ .

Poszwa e Rutkowski [16] calcularam a correção relativística de primeira ordem para o estado fundamental do átomo de hidrogênio sujeito a um campo magnético de intensidade no intervalo de  $0 \leq B \leq 10^{13}$  G.

Em outro trabalho Poszwa e Rutkowski [17] analisaram o problema do átomo de hidrogênio sujeito a um campo magnético intenso não relativístico resolvendo a equação de Schrödinger e depois utilizando a teoria de perturbação direta (DPT) para calcular a primeira correção relativística. Tanto a parte relativística ( $Z^2/c^2$ ) quanto à parte relativa ao campo magnético ( $B/Z^2$ ), foram incluídas no problema como perturbações. Nesse trabalho, os autores calcularam as energias para o caso não relativístico e também as correções em primeira ordem para os estados atômicos de baixa energia  $2s$  e  $2p$  do átomo de hidrogênio sujeito a um campo magnético externo.

Devido ao comportamento assintótico das funções radiais, os autores utilizaram o método de expansão do inverso de uma série de potência que fornece resultados com melhor precisão em comparação com o uso do método simples de decaimento exponencial.

Um apontamento importante de Poszwa e Rutkowski obtido dos cálculos realizados nesse trabalho é a necessidade de incluir correções relativísticas para

obter resultados com melhor precisão. Para estados excitados essa necessidade é ainda mais latente pois, com a presença de campos magnéticos intensos, as correções em primeira ordem são algumas ordens de grandezas maiores do que para o átomo livre.

Em outro trabalho mais recente, Poszwa e Rutkowski [18] estudaram o átomo de hidrogênio 2D na presença de um campo magnético constante perpendicular ao plano de movimento do elétron e calcularam a correção relativística em primeira ordem. Segundo eles estes sistemas tem sido amplamente investigados devido sua relação com o desenvolvimento de tecnologias em física de semicondutores e também um rápido avanço de tecnologias com nanoestruturas.

Usando o método de expansão em séries de potência resolveram o problema não relativístico de autovalores de energia para um campo magnético arbitrário. E através da DPT calcularam a correção de energia em primeira ordem para o átomo de hidrogênio. Nesse trabalho, Poszwa e Rutkowski calcularam as energias e as correções para o estado fundamental, com grande precisão em comparação com os resultados relativísticos já conhecidos, e também para alguns estados excitados mantendo a expectativa de resultado com igual precisão.

Dimova, Kaschiev e Vinitsky [19] utilizaram o método Kantorovich para calcular com alta precisão os níveis de energia do átomo de hidrogênio sujeito a um campo magnético. O método empregado, utilizando a base do método de elemento finito, permitiu o cálculo dos níveis de energia para diversas intensidades de campo magnético partindo do caso sem campo magnético até o caso onde temos campos magnéticos extremamente intensos. Com a utilização do método Kantorovich o problema de autovalores em 2D é reduzido a um problema de autovalores em 1D.

Eles [19] optaram por utilizar o sistema de coordenadas esféricas com base na comparação com outros trabalhos que utilizaram este sistema de coordenadas e obtiveram bons resultados para as energias. Quando comparados aos resultados conhecidos, obtiveram resultados com grande precisão, mostrando a efetividade do método utilizado.

Calvin Stubbins, Kunal Das e Yohannes Shiferaw [20] utilizaram dois tipos de bases pra resolver o Hamiltoniano de Schrödinger para o átomo de hidrogênio sujeito a um campo magnético. Inicialmente, utilizando a base de Coulomb, calcularam com boa precisão as energias para campos de menor intensidade onde a simetria esférica é predominante devido as interações coulombianas. Para campos de grande intensidade a utilização desta base não é conveniente já que os valores não convergem para o que era esperado.

Para campos de maior intensidade, devido a predominância da simetria cilíndrica, os autores utilizaram outra base. A base escolhida, que nos casos limites de Coulomb ( $B \rightarrow 0$ ) e Landau ( $Z \rightarrow 0$ ) assume a forma analítica das soluções exatas, apresenta bons resultados para toda a gama de intensidade do campo magnético ( $0 \leq B < \infty$ ). Isto fica evidente quando são comparados os resultados utilizando as duas bases para campos magnéticos de menor intensidade. Em ambos os casos, as bases e o Hamiltoniano de Schrödinger foram escritos em coordenadas parabólicas.

Obtiveram resultados que para alguns valores de campo magnético chegam a ter trinta casas decimais. Os resultados possuem grande precisão quando comparados aos valores com maior precisão conhecidos e com o dobro de algarismos significativos para toda a gama de intensidade do campo magnético considerada.

Motivados pela necessidade de compreender o espectro de estrelas de nêutrons e anãs brancas Anand Thirumalai e Jeremy S Heyl [21] estudaram os níveis de energia do átomo de hidrogênio e do átomo de hélio sob a ação de um campo magnético de grande intensidade já que estes elementos são os mais comuns nas atmosferas de tais corpos celestes. Para valores de campo magnéticos intensos verificaram que as interações entre o elétron e o núcleo no átomo de hidrogênio vão se tornando menos dominantes com o incremento do campo magnético.

A equação de autovalores para o átomo de hidrogênio é resolvida através da discretização da equação de autovalores e solução do problema de autovalores resultante. Para discretização foi usado o método de elemento finito

(FEM – Free Complement Method). O problema de autovalores foi resolvido usando uma matriz que forneceu valores precisos para diferentes valores do número quântico azimutal e também diferentes valores de campo magnético.

Nakashima e Nakatsuji [22] calcularam as energias do átomo de hidrogênio na presença de um forte campo magnético considerando os casos relativístico e não relativístico através da solução das equações de Schrödinger e de Dirac respectivamente. No escopo deste trabalho foram considerados campos magnéticos de grande intensidade iniciando com campos da ordem de  $10^{13}\text{G}$ , presentes em estrelas de nêutrons, e estes campos foram incrementados até a ordem de  $10^{19}\text{G}$  para a equação de Schrödinger e  $10^{16}\text{G}$  para a equação de Dirac o que mostra a vasta aplicabilidade deste problema nos estudos de astrofísica. Devido a incapacidade de gerarmos campos magnéticos em laboratório além de  $10^7\text{G}$ , as observações no espaço se tornam muito importantes para o estudo da interação da matéria com campos magnéticos de grande intensidade.

O método utilizado, que foi desenvolvido pelos próprios autores em trabalhos anteriores, consiste em um método de livre complemento que fornece uma série que converge rapidamente para as funções de onda exatas das equações Schrödinger e Dirac, sob a forma de uma expansão analítica. Através desse método eles resolveram com grande precisão as equações de Schrödinger e Dirac para átomos e moléculas. O interessante é que o método é aplicável para sistemas não relativísticos e relativísticos sem a necessidade de grandes alterações. Outra característica importante é que o equilíbrio entre os diferentes espinores é obtido quando a função de onda é gerada. Foram utilizados os orbitais de Landau para os cálculos realizados nesse trabalho.

Uma conclusão importante de Nakashima e Nakatsuji é que com o incremento do campo magnético  $B$  o elétron se aproxima do núcleo mas não tanto ao longo do eixo  $z$  mesmo para campos magnéticos ultra intensos. Isto faz com que à medida que  $B$  aumenta a função de onda fique altamente distorcida se achatando e ao mesmo tempo se alongando ao longo do eixo  $z$ .

## 3.2 Formulações e Métodos Consolidados

Como vimos na seção anterior, diversos autores tem estudado os níveis de energia do átomo de hidrogênio sob a ação de um campo magnético utilizando diversos métodos e formulações. Neste capítulo vamos apresentar como os métodos tem sido abordados por esses autores, principalmente a partir das teorias da mecânica quântica não relativística e relativística.

O potencial vetor pode ser escrito em termos do campo magnético externo  $\vec{B}$  como:

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r} \quad (3.1)$$

O momento é transformado devido a presença do campo magnético da seguinte forma:

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \quad (3.2)$$

em que  $e$  é a carga e  $c$  a velocidade da luz no vácuo.

Podemos escrever o Hamiltoniano de Schrödinger a menos do termo relativo ao spin como:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r) - \frac{e}{2mc} (\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) + \frac{e^2 \vec{A}^2}{2mc^2} \quad (3.3)$$

em que  $m$  é a massa da partícula e  $V(r)$  é o potencial devido as interações coulombianas.

Como o potencial vetor satisfaz a relação

$$\nabla \cdot \vec{A} = 0$$

ele comuta com  $\vec{p}$  e usando o fato de que

$$\vec{B} \times \vec{r} \cdot \vec{p} = \vec{B} \cdot \vec{r} \times \vec{p} = \vec{B} \cdot \vec{L}$$

onde  $\vec{L}$  é o momento angular orbital, podemos então reescrever a equação (3.3)

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r) - \frac{e}{2mc} BL_z + \frac{e^2 \vec{A}^2}{2mc^2} \quad (3.4)$$

Onde  $L_z$  é a componente do momento angular na direção  $z$ . Os dois primeiros termos são equivalentes ao átomo de hidrogênio sem a presença do campo magnético externo e os outros termos podem, por exemplo, ser tratados na mecânica quântica não relativística como perturbações.

Outro formalismo também muito utilizado é a equação de Klein-Gordon que, segundo a literatura, já havia sido obtida por Schrödinger antes mesmo do desenvolvimento da mecânica quântica não relativística como uma formulação mais interessante para estudar o espectro do átomo de hidrogênio na presença de campos eletromagnéticos. A equação de Klein-Gordon pode ser escrita na notação covariante como:

$$\left( \partial_\mu \partial^\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi(\vec{r}, t) = 0 \quad (3.5)$$

em que  $\hbar$  é a constante de Planck reduzida ou, para alguns, constante de Dirac e  $\psi(\vec{r}, t)$  é a função de onda.

A equação de Klein-Gordon não permite graus de liberdades internos e portanto descreve apenas partículas sem spin. Uma das contribuições centrais de Dirac foi generalizar essa equação para funções de onda com mais de uma componente possibilitando a inclusão do spin. O Hamiltoniano de Dirac para o átomo de hidrogênio na presença de um campo magnético externo, pode ser escrito como:

$$H = c \vec{\alpha} \cdot \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) + \beta mc^2 - V(r) \quad (3.6)$$

onde  $\vec{\alpha}$  e  $\beta$  são as matrizes de Dirac (4x4) que são escritas em termo das matrizes de Pauli.

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

O trabalho de Simola e Virtamo [4] foi desenvolvido a partir do Hamiltoniano não relativístico para o átomo de hidrogênio sujeito a um campo magnético

$$H = \frac{\vec{\pi}^2}{2m} + V(r) \quad (3.7)$$

$\vec{\pi} = \vec{p} + e\vec{A}$  é o operador momento cinético,  $\vec{A}$  é o potencial vetor associado ao campo magnético e  $V(r)$  é o potencial de Coulomb.

O campo magnético uniforme  $\vec{B}$ , como em outros trabalhos e inclusive no nosso, foi escolhido orientado ao longo do eixo  $z$ . A equação de Schrödinger que permite encontrar os autovalores de energia foi por representada eles por [4]:

$$H\Psi = \left[ H_0 + \frac{p_z^2}{2m} + V(r) \right] \Psi = E\Psi \quad (3.8)$$

Onde  $E$  é a energia e

$$H_0 = \hbar\Omega \left( \pi_+\pi_- + \frac{1}{2} \right)$$

com

$$\Omega = \frac{eB}{m}$$

Os operadores presentes em  $H_0$  foram definidos por Simola e Virtamo como [4]:

$$\pi_{\pm} = \frac{\lambda}{\hbar} \frac{\pi_x \pm \pi_y}{\sqrt{2}} \quad (3.9)$$

onde  $\lambda = \left( \frac{\hbar}{eB} \right)^{\frac{1}{2}}$  é o comprimento do raio de Larmor, ou seja, o raio da orbita do elétron que executa um movimento de precessão em torno da direção do campo magnético até se alinhar com ele.

Definindo o parâmetro  $\beta = B/B_0$  e fazendo as devidas substituições e as adequações, a equação (3.8) pode ser reescrita como

$$\left[ \beta \left( \pi_+ \pi_- + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2} \frac{d^2}{dz^2} - \frac{1}{r} \right] \Psi = E \Psi \quad (3.10)$$

Sabemos que, devido a presença do campo magnético, teremos diferentes simetrias para os termos  $H_0$  e  $V(r)$  do Hamiltoniano. Dependendo da intensidade do campo magnético e do campo de Coulomb poderemos ter um domínio da simetria esférica ou da simetria cilíndrica. Para campos magnéticos muito intensos a simetria cilíndrica é dominante.

Para este último caso, o acoplamento entre o movimento transversal e longitudinal do elétron é pequeno. Simola e Virtamo escreveram a função de onda aproximadamente como um produto direto [4]

$$\Psi(r) = \Phi(r_\perp) \psi(z) \quad (3.11)$$

onde  $\Phi(r_\perp)$  é uma autovetor de  $H_0$ .

Uma escolha sugestiva devido a simetria rotacional do problema para a componente transversal da função de onda consiste nos orbitais de Landau que podem ser escritos em coordenadas cilíndricas como

$$\Phi_{nm}(\rho, \varphi) \equiv \langle r_\perp | n, m \rangle = \frac{1}{(2\pi\lambda^2)^{\frac{1}{2}}} \exp(im\varphi) \exp\left(-\frac{\zeta}{2}\right) \zeta^{\frac{|m|}{2}} P_{nm}(\zeta) \quad (3.12)$$

onde  $\zeta = \rho^2/2\lambda^2$  e  $P_{nm}$  é associado aos polinômios de Laguerre.

Substituindo as equações (3.11) e (3.12) em (3.10) obtiveram a parte longitudinal da função de onda

$$\left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dz^2} + (2n+1)\beta - \beta^{1/2} V_{n'n}^m(\beta^{1/2}z) \right) \psi(z) = E \psi(z) \quad (3.13)$$

Onde foi introduzida a notação

$$\langle n', m | 1/r | n, m \rangle = \beta^{1/2} V_{n'n}^m(\beta^{1/2}z)$$

Mostraram que o potencial teria um comportamento assintótico

$$V_{n'n}^m(z) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} \frac{1}{|z|^{1+2|n'-n|}} \quad (3.14)$$

Por causa do comportamento assintótico do potencial o número de soluções da equação (3.13) é numericamente infinito. Cada solução diferente foi denominada pelos autores [4] por um número  $k$  e assim um conjunto aproximado de autoestados caracterizado por três números quânticos  $n$ ,  $m$  e  $k$  fora obtido. Esta é uma aproximação adiabática que havia sido proposta inicialmente por Canuto e Kelly [4].

Para obter uma solução exata para o problema e encontrar os autovalores de energias escreveram a função de onda de outra forma onde o acoplamento entre os orbitais de Landau devido ao potencial de Coulomb esfericamente simétrico é considerado. A função de onda foi então representada por [4]:

$$\Psi_m = \sum_{v=v_0}^{\infty} |v, m\rangle \psi_m^v(z) \quad (3.15)$$

o que substituindo na equação (3.10) leva a um sistema de equações diferenciais de funções  $\psi_m^v$ . Os autores representaram esse sistema de equações na forma matricial

$$\left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dz^2} \mathbf{I} + \mathbf{K} - \beta^{1/2} \mathbf{V}^m(\beta^{1/2} z) \right) \Psi_m = E \Psi_m \quad (3.16)$$

onde a função de onda foi considerada como um vetor

$$\Psi_m = (\psi_m^{v_0}(z), \psi_m^{v_0+1}(z), \dots)^T \quad (3.17)$$

e as matrizes  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{V}^m$  foram definidas por

$$\begin{aligned} K_{ij} &= (2i + 1)\gamma\delta_{ij} \\ V_{ij}^m &= V_{ij}^m(x) \end{aligned} \quad i, j = v_0, v_0 + 1, \dots$$

No caso em que temos campos magnéticos de grande intensidade os termos da matriz fora da diagonal aproximam de zero devido à forma do potencial que de acordo com a equação (3.14) é definida por

$$\beta^{1/2} V_{ij}^m(\beta^{1/2} z) \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{|z|} \left( \frac{1}{\beta z^2} \right)^{|i-j|}.$$

Assim, a equação (3.16) se reduziria a um conjunto de equações desacopladas equivalente ao que se tinha na aproximação adiabática.

Uma solução para o átomo de hidrogênio relativístico foi proposta por Lindgren e Virtamo [5] a partir da equação de Dirac. A equação de Dirac para o caso é

$$H\Psi = E\Psi \quad (3.18)$$

o Hamiltoniano de Dirac pode ser representado por [5]

$$H = c\vec{\alpha} \cdot \vec{\pi} + \beta mc^2 - V(r) = \begin{pmatrix} mc^2 - V & c\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \\ c\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} & -mc^2 - V \end{pmatrix}. \quad (3.19)$$

Onde  $\vec{\alpha}$  e  $\beta$  são as matrizes de Dirac,  $\vec{\sigma}$  é composto pelas matrizes de Pauli,  $\vec{\pi}$  é o operador momento cinético relacionado ao momento linear por

$$\vec{\pi} = \vec{p} + e\vec{A}$$

e  $\vec{A}$  está associado ao campo magnético como apresentado na equação (3.1).

Antes de resolver a equação geral consideraram o caso em que o elétron estaria sujeito puramente ao campo magnético, ou seja,  $V = 0$  cuja solução já havia sido obtida por Johnson e Lippman [5]. Os estados são rotulados pelo número quântico de Landau ( $M$ ), pela componente  $z$  do momento angular total, pelo número de onda longitudinal  $k$  e pelo número quântico  $s$ . Os autovalores de energia neste caso seriam dados por

$$E = \pm [(c\hbar k)^2 + m^2 c^4 + 2e\hbar c^2 BN]^{1/2} \quad (3.20)$$

que são degenerados com relação aos números quânticos  $j$  e  $s$ . Os autoespinores  $\Psi_{N,j,k,s}$  neste caso são

$$\begin{aligned}
\Psi_{N,j,k,1} &= \begin{pmatrix} (mc^2 + E) |N-1, j - \frac{1}{2}, k\rangle \\ 0 \\ c\hbar k |N-1, j - \frac{1}{2}, k\rangle \\ 2e\hbar c^2 BN |N, j + \frac{1}{2}, k\rangle \end{pmatrix} \\
\Psi_{N,j,k,2} &= \begin{pmatrix} 0 \\ (mc^2 + E) |N, j + \frac{1}{2}, k\rangle \\ 2e\hbar c^2 BN |N-1, j - \frac{1}{2}, k\rangle \\ -c\hbar k |N, j + \frac{1}{2}, k\rangle \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.21}$$

Os estados podem ser representados por

$$\langle \vec{r} | n, m, k \rangle = \psi_{n,m}(\vec{r}_\perp) \phi_k(z)$$

onde o estado longitudinal é

$$\phi_k(z) = \langle z | k \rangle = L^{-1/2} \exp(ikz)$$

$L$  é introduzido para normalizar a função. Os orbitais transversais de Landau são

$$\begin{aligned}
\psi_{nm}(r_\perp) = \langle r_\perp | n, m \rangle &= \left( \frac{n!}{2\pi\lambda^2(n-m)!} \right)^{1/2} \exp\left( im\phi - \frac{\zeta}{2} \right) \zeta^{-\frac{m}{2}} L_n^{(-m)}(\zeta) \\
n &= 0, 1, 2, \dots \quad n - m = 0, 1, 2, \dots
\end{aligned} \tag{3.22}$$

onde  $\zeta = r_\perp^2 / 2\lambda^2$ ,  $\lambda^2 = \hbar / eB$  e  $\phi = \arg(x + iy)$ .  $L_n^\alpha$  são os polinômios generalizados de Laguerre.

Como, para campos magnéticos de grande intensidade, a parte transversal dos espinores é apenas levemente distorcida, os autores [5] introduziram um conjunto de vetores de bases ortogonais no espaço dos espinores transversais  $\{u_{N,j}^{(r)}\}$  como mostrado abaixo

$$u_{N,j}^{(1)} = i \begin{pmatrix} |N-1, j - \frac{1}{2}\rangle \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad u_{N,j}^{(2)} = i \begin{pmatrix} 0 \\ |N, j + \frac{1}{2}\rangle \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{3.23}$$

$$u_{N,j}^{(3)} = i \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ |N-1, j-\frac{1}{2}\rangle \\ 0 \end{pmatrix} \quad u_{N,j}^{(4)} = i \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ |N, j+\frac{1}{2}\rangle \end{pmatrix}$$

$$N = 0, 1, 2, \dots \quad j = N - \frac{1}{2}, N - \frac{3}{2}, \dots$$

onde  $\alpha$  é a constante de estrutura fina. Por causa das restrições impostas pela equação (3.22) para  $N = 0$  dois espinores de anulam. Como  $J_z$  comuta com o Hamiltoniano, o número quântico  $j$  foi considerado por eles como um bom número para determinar a energia exata dos auto espinores.

Na base definida (3.23), um estado qualquer com um número quântico  $j$  exato pode ser escrito [5]

$$\Psi_m = \sum_{r=1}^4 \sum_{N'=\max\{0, j+\frac{1}{2}\}}^{\infty} f_{N',j}^{(r)}(z) u_{N',j}^{(r)} \quad (f_{0,j}^{(1)} = f_{0,j}^{(3)} = 0) \quad (3.24)$$

Substituindo na equação de Dirac e tomando as projeções nos vetores de base  $\{u_{N',j}^{(r)}\}$  com  $j$  fixado a equação de Dirac é transformado no conjunto de diferentes equações diferenciais ordinárias abaixo:

$$\begin{aligned} \delta f_{N,j}^{(1)} - \beta^{1/2} \sum_{N'} f_{N',j}^{(1)} V_{N-1, N'-1}^{j-\frac{1}{2}}(\beta^{1/2}z) - \frac{d}{dz} f_{N,j}^{(3)} + 2(N\beta)^{1/2} f_{N,j}^{(4)} &= 0 \\ \delta f_{N,j}^{(2)} - \beta^{1/2} \sum_{N'} f_{N',j}^{(2)} V_{N, N'}^{j+\frac{1}{2}}(\beta^{1/2}z) + 2(N\beta)^{1/2} f_{N,j}^{(3)} - \frac{d}{dz} f_{N,j}^{(4)} &= 0 \\ \frac{d}{dz} f_{N,j}^{(1)} + 2(N\beta)^{1/2} f_{N,j}^{(2)} - (2 - \alpha^2 \delta) f_{N,j}^{(3)} - \alpha^2 \beta^{1/2} \sum_{N'} f_{N',j}^{(3)} V_{N-1, N'-1}^{j-\frac{1}{2}}(\beta^{1/2}z) &= 0 \\ 2(N\beta)^{1/2} f_{N,j}^{(1)} + \frac{d}{dz} f_{N,j}^{(2)} - (2 - \alpha^2 \delta) f_{N,j}^{(4)} - \alpha^2 \beta^{1/2} \sum_{N'} f_{N',j}^{(4)} V_{N, N'}^{j+\frac{1}{2}}(\beta^{1/2}z) &= 0 \end{aligned} \quad (3.25)$$

onde

$$N = N_0, N_0 + 1, \dots \quad N_0 = \max\{0, j + \frac{1}{2}\}$$

Foram utilizadas unidades atômicas com  $a_0 = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / me^2$ ,  $2E_H = e^2 / 4\pi\epsilon_0 a_0$  e  $B_0 = 4E_H m / e\hbar$  como unidades de comprimento, de energia e densidade do fluxo magnético respectivamente.  $\beta$  e  $\delta$  são definidos, respectivamente, como densidade de fluxo e energia dinâmica,  $\beta = B/B_0$  e

$\delta = (mc^2 - E)/2E_H$ . A função potencial que aparece nas equações (3.25) é definida, como já havia feito Simola e Virtamo [4], por

$$\beta^{1/2} V_{n,n'}^m(\beta^{1/2} z) = \langle n, m | 1/r | n', m \rangle$$

onde  $V_{n,n'}^m(x)$  já foi definido na equação (3.14).

Dentro dos propósitos do trabalho de Lindgren e Virtamo, analisaram os limites em que  $\alpha \rightarrow 0$  e  $B \rightarrow \infty$ . Considerando esse primeiro caso, as duas últimas equações de (3.25) são simplificadas. Resolvendo para  $f_{N,j}^{(3)}$  e  $f_{N,j}^{(4)}$  e substituindo nas duas primeiras equações de (3.25) obtiveram equações desacopladas:

$$\begin{aligned} \left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dz^2} + 2N\beta + \delta \right) f_{N,j}^{(1)} - \beta^{1/2} \sum_{N'} f_{N',j}^{(1)} V_{N-1,N'-1}^{j-\frac{1}{2}}(\beta^{1/2} z) &= 0 \\ \left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dz^2} + 2N\beta + \delta \right) f_{N,j}^{(2)} - \beta^{1/2} \sum_{N'} f_{N',j}^{(2)} V_{N,N'}^{j-\frac{1}{2}}(\beta^{1/2} z) &= 0 \end{aligned} \quad (3.26)$$

onde

$$N = N_0, N_0 + 1, \dots \quad N_0 = \max \{0, j + \frac{1}{2}\}$$

Estas equações (3.26) são equivalentes as que foram obtidas por Simola e Virtamo [4] para o caso não relativístico.

O outro limite considerado por eles,  $B \rightarrow \infty$ , é estudado considerando a função de potencial que, no limite, como já havia sido mostrado por Simola e Virtamo [4] assume a seguinte forma [5]:

$$\beta^{1/2} V_{n,n'}^m(\beta^{1/2} z) \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{|z|} \left( \frac{1}{\beta z^2} \right)^{|n'-n|} \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \frac{\delta_{n,n'}}{|z|}$$

Com isso, as infinitas somas do sistema de equações (3.25) ficariam reduzidas a um único termo que levaria a um sistema de quatro equações desacopladas para cada valor de  $N$ . A extensão deste sistema de equações desacopladas para campos finitos é chamada por eles de aproximação adiabática que, segundo os

próprios autores, traz o que há de novo em um tratamento relativístico do problema. Nesta aproximação eles definiram:

$$\beta^{1/2}V_{n,n'}^m(\beta^{1/2}z) \approx \delta_{n,n'}\beta^{1/2}V_{n,n}^m(\beta^{1/2}z).$$

Representaram também as equações da aproximação adiabática na forma matricial

$$H_{N,j}f_{N,j}(z) = 0 \quad (3.27)$$

onde

$$H_{N,j} = \begin{pmatrix} \delta - P_1 & 0 & -d/dz & 2(N\beta)^{1/2} \\ 0 & \delta - P_2 & 2(N\beta)^{1/2} & -d/dz \\ d/dz & 2(N\beta)^{1/2} & -[(2 - \alpha^2\delta) + \alpha^2P_1] & 0 \\ 2(N\beta)^{1/2} & d/dz & 0 & -[(2 - \alpha^2\delta) + \alpha^2P_2] \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

com  $P_1 = \beta^{1/2}V_{N-1,N-1}^{j-\frac{1}{2}}(\beta^{1/2}z)$  e  $P_2 = \beta^{1/2}V_{N,N}^{j+\frac{1}{2}}(\beta^{1/2}z)$ . A equação (3.28) é o operador reduzido de Dirac e

$$f_{N,j}(z) = \begin{pmatrix} f_{N,j}^{(1)}(z) \\ f_{N,j}^{(2)}(z) \\ f_{N,j}^{(3)}(z) \\ f_{N,j}^{(4)}(z) \end{pmatrix} \quad (3.29)$$

é o espinor longitudinal.

Considerando grandes distâncias do próton,  $z \gg 1$ , o potencial  $V$  se anula, e as soluções para a equação de Dirac aproximam da solução do elétron sem a presença do campo eletrostático expressa na equação (3.21). Para os estados ligados o número de onda  $k$  é imaginário,  $k = -iK$ . Assim, a equação (3.20) que fornece os autovalores de energia foi reescrita por eles utilizando unidades atômicas e a definição de energia dinâmica  $\delta$

$$K_N = (2\delta - \alpha^2\delta^2 + 4N\beta)^{1/2}. \quad (3.30)$$

O interesse da astrofísica nas interações do átomo de hidrogênio com campos magnéticos de grande intensidade foi também motivação para que Patil

[6] estudasse as correções para energia de ligação de estados de menor energia com relação a um campo magnético finito de grande intensidade. Com isso, conseguiu também obter informações sobre a estrutura dos níveis de energia o que é interessante dentro do escopo do nosso trabalho.

Os resultados foram obtidos por ele a partir do Hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2}p^2 - r^{-1} + \frac{1}{8}\gamma(x^2 + y^2) + \frac{1}{2}\gamma^{1/2}L_z \quad (3.31)$$

onde unidades atômicas foram utilizadas ( $m = e = \hbar = 1$ ) e  $\gamma = c^{-2}B^2$  com  $\gamma = 1$  sendo equivalente a um campo magnético de  $2,35 \times 10^9$ G.

Como o interesse era de campos magnéticos de grande intensidade, Patil avaliou como seriam as correções de energia neste caso. Para tanto, definiu uma variável  $\beta$  [6]

$$\beta = \frac{1}{2}\gamma^{-1/2}$$

e avaliou as correções de energia para quando  $\beta \rightarrow 0$ .

A partir destes resultados, Patil mostrou que os níveis de energia para o átomo de hidrogênio na presença de um campo magnético finito de grande intensidade seriam dados por [6]

$$E_{n,m}(\gamma) = \frac{1}{2}\gamma^{1/2} - \frac{1}{2}n^{-2}(1 + 8n^{-1}(m+1)\beta \ln \beta) \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.32)$$

$$E_{n,m}(\gamma) = \frac{1}{2}\gamma^{1/2} - \frac{1}{2n^2} \left( 1 + \frac{4}{n \ln \beta} \right) \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.33)$$

$$E_{0,m}(\gamma) = \frac{1}{2}\gamma^{1/2} - \frac{1}{2}(\ln \beta)^2 \quad (3.34)$$

onde a equação (3.32) fornece os níveis de energia para os estados ímpares cuja degenerescência com relação ao número quântico magnético  $m$  fora levantada, a

equação (3.33) fornece os níveis de energia para os estados pares e a equação (3.34) fornece a energia do estado fundamental.

Marko Robnik e Eberhard Schrüfer [7] aplicaram um método de quantização desenvolvido por Robnik ao Hamiltoniano clássico que descreveria o problema do átomo de hidrogênio sujeito a um campo magnético externo. O Hamiltoniano clássico para esse sistema é dado por

$$H = \frac{1}{2}\vec{p}^2 - r^{-1} + \frac{1}{8}\gamma^2\rho^2 \quad (3.35)$$

onde foi definido  $\rho^2 = x^2 + y^2$ ,  $r^2 = z^2 + \rho^2$  e  $\gamma = B/B_0$  ( $B_0 = 2,35 \times 10^9\text{G}$ ) com as coordenadas medidas nas unidades do raio de Bohr e a energia em unidades atômicas.

Para escrever a equação (3.35) em coordenadas parabólicas definiram as seguintes variáveis:

$$\xi \equiv r - z \quad \eta \equiv r + z$$

e então reescreveram a equação (3.35) na seguinte forma

$$H = \frac{2\xi}{\xi + \eta}p_\xi^2 + \frac{2\eta}{\xi + \eta}p_\eta^2 + \frac{m^2}{2\xi\eta} - \frac{2}{\xi + \eta} + \frac{\gamma^2}{8}\xi\eta \quad (3.36)$$

onde  $m = p_\phi$  o componente  $z$  do momento angular.

Utilizando as transformações canônicas

$$\xi = u^2 \quad p_\xi = p_u/2u$$

$$\eta = v^2 \quad p_\eta = p_v/2v$$

e utilizando também

$$u(-2E)^{1/4} \rightarrow u \quad v(-2E)^{1/4} \rightarrow v$$

$$p_u/(-2E)^{1/4} \rightarrow p_u \quad p_v/(-2E)^{1/4} \rightarrow p_v$$

finalmente o Hamiltoniano efetivo

$$\begin{aligned}\mathcal{H}(u, v, p_u, p_v) &= \frac{2}{(-2E)^{\frac{1}{2}}} \\ &= \frac{1}{2}(u^2 + p_u^2) + \frac{1}{2}(v^2 + p_v^2) + \frac{m^2}{2}\left(\frac{1}{u^2} + \frac{1}{v^2}\right) + \frac{1}{8}Gu^2v^2(u^2 + v^2)\end{aligned}\quad (3.37)$$

onde

$$G = \gamma^2 / (-2E)^2$$

Robnik e Schrüfer consideraram apenas o caso em que o número quântico  $m = 0$ . Utilizando a forma normalizada obtida por Birkhoff-Gustavson para o Hamiltoniano efetivo  $\mathcal{H}$ , e fazendo uma correção semiclássica para que o resultado do estado fundamental estivesse corretamente representado, resolveram  $\mathcal{H}$  em relação a  $E$ . Encontraram uma expansão da energia

$$\begin{aligned}E &= -\frac{1}{2N^2}\left\{1 - \frac{1}{8}\gamma^2 N^4(3\tau_1\tau_2 + K^2 + K^{*2})\right. \\ &\quad + \frac{1}{1536}\gamma^4 N^8[\tau_1\tau_2(65\tau_1^2 + 93\tau_1\tau_2 + 65\tau_2^2) \\ &\quad \left. + (K^2 + K^{*2})(33\tau_1^2 - 40\tau_1\tau_2 + 33\tau_2^2) - 3(K^4 + K^{*4})\right]\end{aligned}\quad (3.38)$$

onde  $N$  é o número quântico principal

$$N = n_1 + n_2 + 1$$

e também

$$\tau_1 = 2n_1 + 1 \quad \tau_2 = 2n_2 + 1 \quad n_1, n_2 = 0, 1, 2, \dots$$

O operador (3.38) foi reescrito separando o primeiro termo que fornece o espectro para o caso em temos apenas o campo de Coulomb, dos demais termos. Assim

$$E = -\frac{1}{2N^2} + E_D \quad (3.39)$$

O operador  $E_D$  foi obtido a partir de (3.38) retirando o primeiro termo apenas que resultou na forma da equação (3.39). Para encontrar o espectro é necessário diagonalizar a equação (3.39), ou seja, é necessário resolver

$$\det(\langle n_1 n_2 | \hat{E}_D | n'_1 n'_2 \rangle - E_D \delta_{n_1 n_2 n'_1 n'_2}) = 0 \quad (3.40)$$

Como exemplos, apresentaram os resultados para o estado fundamental e o primeiro estado excitado. Para o estado fundamental,  $N = 1$ , obtiveram

$$E_{00} = -\frac{1}{2} + \frac{3}{16}\gamma^2 - \frac{223}{3072}\gamma^4 + \dots \quad (3.41)$$

O primeiro estado excitado,  $N = 2$ , através de (3.40) e (3.38) obtém-se as energias dos dois níveis possíveis

$$\begin{aligned} E_{2s0} &= -\frac{1}{8} + \left(\frac{9}{4} + \frac{6^{1/2}}{2}\right)\gamma^2 \\ E_{2p0} &= -\frac{1}{8} + \left(\frac{9}{4} - \frac{6^{1/2}}{2}\right)\gamma^2 \end{aligned} \quad (3.42)$$

o que, segundo os autores, mostra que o método utilizado pode fornecer resultados que estão de acordo com os obtidos na teoria quântica utilizando perturbações.

Pelos resultados obtidos, Birkhoff-Gustavson é uma boa aproximação desde que a razão entre dois termos sucessivos tenham valores suficientemente pequenos. Robnik e Schrüfer estimaram que

$$r \simeq \gamma^2 \tau^2 / (-2E)^2 \simeq N^6 \gamma^2 \quad (3.43)$$

e concluíram que para  $r \ll 1$  a série (3.38) oferece valores suficientemente bons já para  $r \approx 1$  a série diverge já nos primeiros termos.

Buscando encontrar as energias do estado fundamental e de alguns estados excitados para o átomo de hidrogênio sujeito a um campo magnético de grande intensidade, Der-San Chuu e Yu-Kuo Lee [9] desenvolveram um método partindo do Hamiltoniano não relativístico

$$H = -\nabla^2 - \frac{2}{r} + \gamma L_z + \frac{\gamma^2}{4}(x^2 + y^2) \quad (3.44)$$

com a energia expressa em termos Rydberg efetivo  $R_0^* = \mu e^4 / 2\hbar^2 \epsilon^2$  onde  $\epsilon$  é a constante dielétrica estática e  $\mu$  é a massa reduzida do sistema e o comprimento é expresso em termos do raio efetivo de Bohr  $a_0^* = \epsilon \hbar^2 / \mu e^2$ . A componente  $z$  do

operador momento angular  $L_z$  é definida por  $-i\partial/\partial\varphi$  e  $\gamma$  é definido por  $\gamma = e\hbar B/2c\mu R_0^*$  sendo que  $\gamma = 1$  com  $B_0 = 2,35 \times 10^9 \text{G}$ .

O problema de autovalores definido pela equação (3.44) não pode ser resolvido exatamente. Para solucionar o problema Der-San Chuu e Yu-Kuo Lee [9] introduziram um parâmetro  $\lambda$  através da adição e subtração do termo  $-2\lambda/|z|$  para separar o Hamiltoniano em quatro partes

$$H = H_I + H_{II} + H_{III} + H_{IV} \quad (3.45)$$

onde

$$H_I = -\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{2\lambda}{|z|}$$

$$H_{II} = -\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \frac{\gamma^2}{4}(x^2 + y^2)$$

$$H_{III} = \gamma L_z$$

$$H_{IV} = \frac{2\lambda}{|z|} - \frac{2}{r}$$

As três primeiras partes  $H_I$ ,  $H_{II}$  e  $H_{III}$  podem ser resolvidas exatamente já o último termo  $H_{IV}$  é tratado como uma perturbação. Para o termo  $H_I$  as soluções são as funções de onda do átomo de hidrogênio em uma dimensão

$$\psi_I(z, \lambda) = N e^{-\sqrt{2}\lambda z} {}_1F_1(1 - 1; 2; 2\sqrt{2}\lambda z)$$

onde  $N$  é a constante de normalização e  ${}_1F_1$  é a função hipergeométrica degenerada. Os autovalores podem ser expressos por

$$E_I^{(0)}(\lambda) = -\frac{\lambda^2}{n^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

As soluções do segundo termo são as funções de onda do oscilador harmônico bidimensional

$$\psi_{II} = N_n N_m H_n(\beta x) H_m(\beta y) e^{-\gamma(x^2 + y^2)}$$

onde  $\beta = \sqrt{2\gamma}$  e  $N_n$  é uma constante de normalização. Os autovalores são

$$E_{II}^{(0)} = (n + m + 1)\gamma \quad , \quad n, m = 0, 1, 2, \dots$$

As soluções do termo  $H_{III}$  são dadas pelos harmônicos esféricos

$$\psi_{III} = Y_m^l(\theta, \varphi)$$

e os autovalores

$$E_{III}^{(0)} = \gamma m \quad , \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

O último termo  $H_{IV}$  é tratado como uma perturbação e as correções de energia são encontradas a partir das funções de ondas não perturbadas utilizando o método de perturbação convencional. Como ilustração, os autores obtiveram a correção de energia em primeira ordem para o estado fundamental

$$\begin{aligned} \Delta E_{1,0,0}^{(1)} = & 2\lambda^2 + 2^{\frac{7}{4}}\lambda^3(4\gamma)\sqrt{4\gamma}\frac{\pi}{2}\int_0^\infty \rho^3 e^{-2\gamma\rho^2} \left[ \left( H_0(2\sqrt{2}\rho) \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{1}{2\sqrt{2}\lambda\rho} H_1(2\sqrt{2}\lambda\rho) \right) \right. \\ & \left. \left. - \left( N_0(2\sqrt{2}\lambda\rho) - \frac{1}{2\sqrt{2}\lambda\rho} N_1(2\sqrt{2}\lambda\rho) \right) \right] d\rho \end{aligned} \quad (3.46)$$

onde  $H_n(2\sqrt{2}\lambda\rho)$  e  $N_n(2\sqrt{2}\lambda\rho)$  são as funções de ordem-n de Struve e Neuman.

Assim, a energia total encontrada por eles pode ser expressa como uma soma dos autovalores obtidos nas soluções exatas e as correções de energia, que para as demais ordens podem ser obtidas como foi mostrado por eles para a de primeira ordem.

$$E_{nlm}(\lambda) = E_I^{(0)} + E_{II}^{(0)} + E_{III}^{(0)} + \Delta E_{nlm}^{(1)} + \Delta E_{nlm}^{(2)} + \Delta E_{nlm}^{(3)} + \dots \quad (3.47)$$

O parâmetro  $\lambda$  pode ser determinado de diversas formas. Por exemplo, pode ser escolhido de modo que a expansão da equação (3.47) convirja mais

rapidamente, de modo que os primeiros termos sejam suficientes. Então  $\lambda$  pode ser determinado pela condição

$$\left| \frac{\Delta E_{nlm}^{(1)}(\lambda)}{E_{nlm}(\lambda)} \right| = \text{mínimo} \quad (3.48)$$

que fica satisfeita se o parâmetro  $\lambda$  satisfizer

$$\Delta E_{nlm}^{(1)}(\lambda) = 0. \quad (3.49)$$

Outro método utilizado para encontrar  $\lambda$  é

$$\frac{\partial E_{nlm}(\lambda)}{\partial \lambda} = 0 \quad (3.50)$$

O resultado exato do Hamiltoniano não depende do parâmetro  $\lambda$  mas muitas vezes só é possível encontrar as soluções aproximadas. Então, para que o resultado aproximado seja o mais próximo do resultado analítico, o parâmetro  $\lambda$  deve ser escolhido de modo que minimize os autovalores de energia ( $E_{nlm}(\lambda)$ ).

No seu trabalho, Der-San Chuu e Yu-Kuo Lee determinaram o parâmetro  $\lambda$  através da equação (3.49) apresentando inclusive uma equação algébrica para o caso do estado fundamental.

Jang-Haur Wang e Chen-Shiung Hsue [10] calcularam os níveis de energia do átomo de hidrogênio utilizando *B-splines* que devido ser altamente localizadas se mostraram uma eficiente maneira de abordar o problema do átomo de hidrogênio sob a ação de um campo magnético arbitrário. Como estavam interessados em também avaliar o comportamento do átomo de hidrogênio para campos magnéticos de alta intensidade, utilizaram coordenadas cilíndricas.

O Hamiltoniano não relativístico para o átomo de hidrogênio sob a ação de um campo magnético uniforme  $\vec{B}$  na direção  $z$ , pode ser representado em coordenadas cilíndricas como

$$H = -\nabla^2 - \frac{2}{r} + \gamma(L_z - 1) + \frac{\gamma^2}{4}\rho^2 \quad (3.51)$$

com

$$r = \sqrt{\rho^2 + z^2} \text{ e } \rho^2 = x^2 + y^2$$

onde o campo magnético é expresso em termos de  $B_0 = 2\alpha^2 m_e^2 c^2 / (e\hbar) \approx 4,70 \times 10^9 \text{G}$  e  $\gamma = 2B/B_0$ . Consideraram apenas o caso de *spin-down* e unidades atômicas de Rydberg.

As autofunções da equação (3.51) podem ser reescritas como

$$\psi(\rho, z, \phi) = \psi(\rho, z)e^{im\phi}.$$

Apenas os estados com  $m = 0$  foram considerados. A função de onda foi representada por eles como uma soma do produto das *B-splines* nas variáveis  $\rho$  e  $z$ .

$$\psi(\rho, z) = \sum_{ij} \alpha_{ij} B_i(\rho) B_j(z).$$

A equação de Schrödinger pode ser escrita como um problema de autovalores na forma matricial para os coeficientes  $\alpha$  como:

$$H\alpha = E S \alpha$$

que foi resolvida utilizando o método variacional baseado no método de Galerkin [25].

Para os propósitos numéricos acharam mais conveniente escrever as *B-splines* como na fórmula de recorrência abaixo

$$B_{i,k,\tau}(\xi) = \frac{\xi - t_1}{t_{i+k+1} - t_1} B_{i,k-1,\tau}(\xi) + \frac{t_{i+k} - \xi}{t_{i+k} - t_{i+1}} B_{i+1,k-1,\tau}(\xi),$$

com

$$B_{i,1,\tau}(\xi) = \begin{cases} 1 & \text{para } t_1 \leq \xi \leq t_{i+1} \\ 0 & \text{demais} \end{cases}$$

$k$  indica a ordem do polinômio e  $\tau$  é uma sequência não decrescente  $\tau = \{t_i\}$ .

Como já foi dito uma vantagem de utilizar as *B-splines* é a facilidade de ajustar os valores da sequência de maneira a se acomodar a diversas situações

físicas e talvez por isso tenham conseguido resultados com boa precisão em comparação com resultados anteriores. Além disso, onde os trabalhos utilizados para comparação apresentavam resultados pouco satisfatórios como nas regiões de transição entre as simetrias de Coulomb e Landau ou para campos magnéticos de grande intensidade, obtiveram resultados bem mais precisos.

Na intenção de resolver o átomo de hidrogênio relativístico na presença de um campo magnético uniforme, Rutkowski e Kozłowski [11] utilizaram uma aproximação para que as correções relativísticas de energia de ordem superiores pudessem ser obtidas. No método utilizado a parte relativística foi introduzida como uma primeira perturbação e a interação com o campo magnético como uma segunda perturbação. Com isto, foi possível estudar a dependência da energia com dois parâmetros físicos  $Z^2/c^2$  e  $B/Z^2$ .

A equação de Dirac para um elétron em torno de um núcleo fixo com carga  $Ze$  onde atua um campo magnético constante,  $B$ , em unidades atômicas é

$$\begin{pmatrix} -Z/r - E & c\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + \vec{A}) \\ c\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + \vec{A}) & -2c^2 - Z/r - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = 0. \quad (3.52)$$

O potencial vetor  $\vec{A}$  é dado por  $\vec{A} = \vec{B} \times \vec{r} / 2$  onde a unidade de  $\vec{B}$  é definida em unidades atômicas.

Introduzindo novas variáveis

$$r \equiv Zr \quad E \equiv E/Z^2 \quad \Psi_i \equiv (c/Z)^{i-1} \Psi_i$$

e a equação (52) pode ser reescrita como

$$(H^{(0,0)} + \lambda H^{(1,0)} + \eta H^{(0,1)} - S^{(0)}E - \lambda S^{(1)}E)\Psi = 0. \quad (3.53)$$

onde

$$H^{(0,0)} = \begin{pmatrix} -1/r & \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & -2 \end{pmatrix} \quad H^{(1,0)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1/r \end{pmatrix}$$

$$H^{(0,1)} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \cdot (\hat{z} \times \vec{r})/2 \\ \vec{\sigma} \cdot (\hat{z} \times \vec{r})/2 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S^{(0)} \equiv S^{(0,0)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad S^{(1)} \equiv S^{(1,0)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

e os dois parâmetros perturbativos  $\lambda = Z^2/c^2$  e  $\eta = B/Z^2$  são referentes aos efeitos relativísticos e magnéticos respectivamente.

A equação de ordem zero

$$(H^{(0,0)} - S^{(0)}E^{(0,0)})\Psi^{(0,0)} = 0 \quad (3.54)$$

é equivalente a equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio. Para encontrar uma teoria completa assumiram que tanto  $E$  quanto  $\Psi$  podem ser expressos como uma série de potências de  $\lambda$  e  $\eta$

$$E = \sum_{i,j} \lambda^i \eta^j E^{(i,j)} \quad \Psi = \sum_{i,j} \lambda^i \eta^j \Psi^{(i,j)} \quad (3.55)$$

Substituindo na equação (3.53) e fazendo o produto escalar por  $\Psi^{(0,0)}$  obtiveram uma expressão para as correções de energia utilizando a seguinte condição

$$\langle \Psi^{(0,0)}, S^{(0)}E^{(0,0)} \rangle = \partial_{0,m} \partial_{0,n}$$

então

$$E^{(m,n)} = \langle \Psi^{(0,0)}, H^{(1,0)}\Psi^{(m,n)} \rangle + \langle \Psi^{(0,0)}, H^{(0,1)}\Psi^{(m,n-1)} \rangle - \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^m \langle \Psi^{(0,0)}, S^{(1)}\Psi^{(m-i-1,j)} \rangle \quad (3.56)$$

De acordo com a equação (3.56) para que se tenha as correções de ordem (m,n) é necessário que se tenha as correções de ordem inferior.

Com a intenção de obter soluções analíticas para o átomo de hidrogênio bidimensional relativístico na presença de um campo magnético homogêneo e perpendicular ao plano onde o elétron estaria localizado, Villalba e Pino [12,13] resolveram a equação de Klein-Gordon 2D obtendo as soluções e também as energias do espectro para determinados valores de m e de intensidade de campo magnético.

A equação de Klein Gordon covariante pode ser escrita

$$\left[ g^{\alpha\beta} \left( \nabla_\alpha - \frac{i}{c} A_\alpha \right) \left( \nabla_\beta - \frac{i}{c} A_\beta \right) - c^2 \right] \Psi = 0 \quad (3.57)$$

onde  $g^{\alpha\beta}$  é o tensor métrico contravariante que pode ser escrito em coordenadas polares  $(r, \vartheta, t)$  na forma

$$g_{\alpha\beta} = \text{diag}(-1, 1, r^2)$$

e o potencial vetor  $A^\alpha$  associado ao campo de Coulomb e ao campo magnético constante é

$$A^\alpha = \left( \frac{-Z}{r}, 0, \frac{Br^2}{2} \right)$$

Considerando que o potencial vetor não depende do tempo e da variável  $\vartheta$  escreveram a função de onda, solução da equação de Klein-Gordon (3.57), como

$$\Psi(r, \vartheta, t) = \frac{u(r)}{\sqrt{r}} \exp(im\vartheta - Et),$$

onde  $u(r)$  deve satisfazer a equação diferencial ordinária de segunda ordem

$$\frac{d^2u(r)}{dr^2} + \left( \frac{\frac{1}{4}m^2 + Z^2/c^2}{r^2} - \frac{mB}{c} - c^2 + \frac{E^2}{c^2} - \frac{1}{4} \frac{r^2 B^2}{c^2} + \frac{2EZ}{c^2 r} \right) u(r) = 0 \quad (3.58)$$

A equação (3.58) não admite solução exata utilizaram portanto métodos de aproximações para obter o espectro de energia. A solução para o caso de Coulomb era conhecida e os níveis de energia são

$$E = c^2 \left( 1 + \frac{Z^2}{c^2 \left( n - \frac{1}{2} + \sqrt{m^2 - Z^2/c^2} \right)^2} \right)^{-1/2}. \quad (3.59)$$

O que também já sabiam é que o espectro para uma partícula sem spin em um campo magnético constante deve satisfazer a relação

$$\frac{E^2}{c^2} - c^2 = \frac{B}{c} (2n + m + |m| + 1). \quad (3.60)$$

Na procura de uma série que solucionasse a equação (3.58) analisaram o comportamento assintótico da solução  $u(r)$  para  $r = 0$  e para  $r \rightarrow \infty$ , escreveram  $u(r)$  na seguinte forma

$$u(r) = \exp\left(-\frac{1}{4} \frac{Br^2}{2}\right) r^{\frac{1}{2} + \sqrt{m^2 - Z^2/c^2}} \sum_{n=0} a_n r^n, \quad (3.61)$$

pela substituição da equação (3.61) e na equação (3.58) e assumindo que  $a_0 \neq 0$  obtiveram

$$a_1 = \frac{2EZ}{(2\sqrt{m^2 - Z^2/c^2} + 1)c^2} a_0 \quad (3.62)$$

e para  $n \geq 2$  obtiveram

$$\begin{aligned} & \left( n^2 + 2n \sqrt{m^2 - \frac{Z^2}{c^2}} \right) a_n + 2a_{n-1} \frac{EZ}{c^2} \\ & + a_{n-2} \left[ \frac{E^2}{c^2} - c^2 - \frac{B}{c} \left( n - 1 + m + \sqrt{m^2 - \frac{Z^2}{c^2}} \right) \right] = 0. \end{aligned} \quad (3.63)$$

Da relação de recorrência (3.63) obtiveram a seguinte relação

$$\frac{E^2}{c^2} - c^2 = \left( m + \sqrt{m^2 - \frac{Z^2}{c^2}} + n \right) \frac{B}{c} \quad (3.64)$$

para os valores de  $B$  que a equação (3.61) se torna um polinômio. A relação (3.64) só faz sentido quando

$$m^2 - Z^2/c^2 > 0,$$

condição esta que impede a existência de níveis  $s$  de energia o que é uma particularidade da solução de Klein-Gordon.

Então para o primeiro estado excitado usando as relações de recorrência (3.62) e (3.63) onde apenas  $a_0$  e  $a_1$  não são nulos, a energia seria dada pela expressão

$$E = c^2 \left( 1 - \frac{4Z^2(2 + m + \sqrt{m^2 - Z^2/c^2})}{c^2(2\sqrt{m^2 - Z^2/c^2} + 1)} \right)^{-1/2}.$$

Apresentaram também uma expressão da energia para quando  $n = 3$  ( $a_2 \neq 0, a_n = 0, n > 2$ ) dada por

$$E = c^2 \left( 1 - \frac{2Z^2(\sqrt{m^2 - Z^2/c^2} + m + 3)}{c^2(3 + 4\sqrt{m^2 - Z^2/c^2})} \right)^{-1/2}.$$

A importância de se obter soluções exatas para alguns valores de campo magnético e de momento angular torna-se evidente quando buscamos calcular soluções numéricas para qualquer valor de  $B$  e  $m$ , particularmente quando campos magnéticos de grande intensidade o que permeia objetivos do nosso trabalho.

Poszwa e Rutkowski [16,17] calcularam as correções relativísticas em primeira ordem para o estado fundamental do átomo de hidrogênio sob a ação de um campo magnético com intensidade de  $0 \leq B \leq 10^{13}\text{G}$ , utilizando a função de onda não relativística generalizada

$$\psi(r, \vartheta, \phi) = e^{im\phi} (r \sin \vartheta)^{|m|} (r \cos \vartheta)^\nu \times \exp\left(-\frac{1}{4} B r^2 \sin^2 \vartheta\right) \eta(r, \vartheta) \quad (3.65)$$

onde

$$\eta(r, \vartheta) = \sum_{k=0}^l (r \sin \vartheta)^{2k} g_{2k}(r)$$

e

$$g_{2k}(r) = \sum_{i=2k}^l A_{i,2k} r^{i-2k}$$

sendo que  $m$  e a paridade na coordenada  $z$ ,  $\nu \pm 1$ , são os números quânticos do problema.

Ao substituir esta função (3.65) na equação de Schrödinger para uma partícula não relativística com spin

$$\left[ \frac{1}{2} (\vec{p} + \vec{A})^2 - \frac{Z}{r} + \frac{1}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \right] \Psi = E \Psi \quad (3.66)$$

onde  $\Psi$  representa o spin orbital com parte espacial dada por  $\psi$ , obtiveram uma relação linear na forma

$$\mathcal{L}(A_{i,j}, A_{i,j+2}, A_{i-2,j-2}, A_{i-2,j}A_{i-1,j}; i, j, |m|, \nu, E_b) = 0 \quad (3.67)$$

Para determinar a solução as condições de contorno foram impostas:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{g'_{2k}(r)}{g_{2k}(r)} = -\sqrt{2E_b} \quad (3.68)$$

onde

$$E_b = (1 + m + |m| + 2m_s)B/2 - E.$$

Um conjunto de funções  $\psi^{(j)}$  ( $j = 0, 1, 2, \dots, l$ ) foi obtido iniciando a partir de

$$A_{2k,2k}^{(j)} = \delta_{j,k},$$

$$A_{i,2k}^{(j)} = 0, \quad i < 2k, \quad k > l$$

e calculando os outros coeficientes  $A_{i,j}^{(n)}$  até  $i = l$ . Posteriormente  $\psi$  foi representada como uma combinação linear de  $\psi^{(j)}$

$$\psi = \sum_{j=0}^l c_j \psi^{(j)}.$$

Eles consideraram as condições de contorno para um raio finito  $r = R$ . Então com relação as condições de contorno

$$g'_{2k}(R) + \sqrt{2E_b}g_{2k}(R) = 0$$

Reduzindo o sistema a um conjunto de  $l + 1$  equações homogêneas em  $c_j$ .

Uma comparação da equação de Dirac na sua forma padrão para um elétron em torno de um núcleo positivo de carga  $Ze$  em unidades atômicas

$$\begin{pmatrix} -Z/r - E & c\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + \vec{A}) \\ c\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + \vec{A}) & -2c^2 - Z/r - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi \\ \Psi_- \end{pmatrix} = 0, \quad (3.69)$$

com a equação de Schrödinger (3.66) reescrita como um sistema de equações acopladas em primeira ordem

$$\begin{pmatrix} -Z/r - E & c\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + \vec{A}) \\ c\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + \vec{A}) & -2c^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi \\ \Psi_- \end{pmatrix} = 0, \quad (3.70)$$

mostra o termo

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -Z/r - E \end{pmatrix}$$

que deve ser tratado como uma perturbação e a correção relativística foi tratada por eles de acordo com a Teoria da Perturbação Direta (DPT).

A correção de energia em primeira ordem foi representada por [16]

$$E^{(1)} = \left\langle \Psi_{-}^{(0)} \left| -\frac{Z}{r} - E^{(0)} \right| \Psi_{-}^{(0)} \right\rangle, \quad (3.71)$$

onde

$$\Psi_{-}^{(0)} = \frac{1}{2c} \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + \vec{A}) \Psi^{(0)} \quad (3.72)$$

$E^{(0)}$  e  $\Psi^{(0)}$  são obtidos da solução da equação de Schrödinger (3.66) não perturbada. Usando a propriedade hermitiana do termo  $\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + \vec{A})$  e também a identidade

$$\begin{aligned} -\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + \vec{A}) \frac{Z}{r} \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + \vec{A}) \\ = i \left( \vec{\nabla} \frac{Z}{r} \right) \cdot (\vec{p} + \vec{A}) - \vec{\sigma} \cdot \left[ \left( \vec{\nabla} \frac{Z}{r} \right) \times (\vec{p} + \vec{A}) \right] - \frac{Z}{r} [(\vec{p} + \vec{A})^2 + \vec{\sigma} \cdot \vec{B}] \end{aligned}$$

substituindo  $[(\vec{p} + \vec{A})^2 + \vec{\sigma} \cdot \vec{B}] \Psi^{(0)}$  na equação de Schrödinger obtiveram o resultado

$$\begin{aligned} c^2 E^{(1)} = -\frac{1}{2} (E^{(0)})^2 + \frac{1}{2} \pi |\Psi^{(0)}|^2 - \frac{1}{2} \left\langle \Psi^{(0)} \left| \frac{Z^2}{r^2} \Psi^{(0)} \right\rangle - E^{(0)} \left\langle \Psi^{(0)} \left| \frac{Z}{r} \Psi^{(0)} \right\rangle \right. \\ \left. + \frac{1}{4} m_s B \left\langle \Psi^{(0)} \left| \frac{Z}{r} \sin^2 \vartheta \Psi^{(0)} \right\rangle + \frac{1}{2} m m_s \left\langle \Psi^{(0)} \left| \frac{Z}{r^3} \Psi^{(0)} \right\rangle \right. \end{aligned}$$

Para o estado fundamental  $m = 0$ ,  $m_s = -\frac{1}{2}$  e  $E^{(0)} = -E_b$ .

Com isto, Poszwa e Rutkowski conseguiram encontrar as correções relativísticas e, quando as energias obtidas usando este método perturbativo foram comparadas com as obtidas utilizando outros métodos, foi verificada a qualidade do método pela precisão dos resultados obtidos. Além dos resultados

apresentados para o estado fundamental [16], conseguiram também resultados com grande precisão para os estados excitados de baixa energia [17].

Levando em conta a crescente importância de sistemas quânticos bidimensionais Poszwa e Rutkowski [18] em outro trabalho, calcularam as correções relativísticas em primeira ordem, incluindo spin, para o estado fundamental e os primeiros estados excitados para o átomo de hidrogênio bidimensional com campo magnético perpendicular ao plano de movimento transversal do elétron, usando a função de onda na forma geral

$$\Psi(r, \phi) = e^{im\phi} e^{-\frac{1}{4Br^2}} r^{|m|} F(r) \chi_{m_s}, \quad (3.73)$$

$$\sigma_z \chi_{m_s} = 2m_s \chi_{m_s}, \quad m_s = \pm \frac{1}{2},$$

onde  $m$  é o número quântico magnético.

Substituindo a função de onda (3.73) na equação de Schrödinger para uma partícula não relativística com spin

$$\left[ \frac{1}{2} (\vec{p} + \vec{A})^2 - \frac{1}{r} - \frac{1}{2} B \sigma_z \right] \Psi = E \Psi \quad (3.74)$$

obtiveram a equação radial como mostrado a seguir

$$\frac{d^2 F}{dr^2} + \left( \frac{2|m| + 1}{r} - Br \right) \frac{dF}{dr} + \left( \frac{2}{r} - 2E_b \right) F = 0 \quad (3.75)$$

onde  $E_b = BL/2 - E$  e  $L = m + |m| + 2m_s + 1$ .

A solução para a equação (3.75) seria então abordada como uma série de potências

$$F(r) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i r^i$$

que, quando substituída na equação (3.75) forneceu uma relação de recorrência linear para os coeficientes  $a_i$ :

$$i(i + |m|)a_i + 2a_{i-1} - (2E_b - 2B + iB)a_{i-2} = 0 \quad (3.76)$$

Analisaram também o comportamento assintótico da equação (3.75) para quando  $r \rightarrow \infty$  e  $B > 0$ ,

$$Br \frac{dF}{dr} + 2E_b F = 0 \quad (3.77)$$

considerando a solução na forma  $F(r) = \text{const} \times r^\alpha$ , onde

$$\alpha = -\frac{2E_b}{B} = \frac{2E}{B} - L.$$

Para determinados valores de campo magnético o comportamento assintótico da função radial pode ser escrito em termos do valor inteiro  $\alpha = n'$ . Neste caso, seria possível encontrar uma solução polinomial para a equação (3.75). Assim, obtiveram da equação (3.76) os valores de campo magnético que forneceriam as soluções exatas

$$B_{n'} = \frac{2E}{n' + L}$$

Os coeficientes da solução polinomial exata formam um conjunto de equações lineares homogêneas

$$\sum_{i=0}^{n'} M_{ki} a_i = 0, \quad k = 0, 1, \dots, n'$$

onde os elementos de matriz são dados por

$$M_{ki} = 2\delta_{ik} + (1 + 1)(i + 2|m| + 1)\delta_{i,k-1} + 2E \frac{n' - i + 1}{n' + L} \delta_{i,k+1}.$$

O valor exato da energia é obtido por

$$\det M(E) = 0$$

A função de onda exata tem a forma

$$\Psi(r, \phi) = e^{im\phi} \chi_{m_s} e^{-\frac{1}{4Br^2} r^{|m|}} \sum_{i=0}^{n'} a_i r^i.$$

Para campos magnéticos arbitrários, eles geraram um conjunto de coeficientes  $a_i$  até  $i = I$  com  $a_0 = 1$  e usando a relação de recorrência (3.76) na forma

$$a_i = [B(i - 2 - \alpha)a_{i-2} - 2a_{i-1}]/(i(i + |m|)).$$

A solução deve satisfazer a condição de contorno

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{F'(r)}{F(r)} = \frac{\alpha}{r}.$$

A solução aproximada pode ser determinada impondo a condição de contorno para a função radial a um raio finito  $r = R$ ,

$$RF'(r) - \alpha F(r) = 0$$

o que leva a uma equação não linear para os níveis de energia

$$\Delta(E) = 0$$

com

$$\Delta(E) = \sum_{i=0}^I (1 - \alpha)a_i R^i.$$

que pode ser resolvida numericamente com a precisão desejada.

Com relação às correções relativísticas utilizaram o mesmo método usado por eles em trabalhos anteriores, como apresentado nas equações (3.71) e (3.72). Com isso obtiveram a correção de energia em primeira ordem escrita na forma

$$\begin{aligned} c^2 E^{(1)} = & -\frac{1}{2}(E^{(0)})^2 - \frac{1}{2}\left(E^{(0)} + \frac{1}{2}mB\right) \left\langle \Psi^{(0)} \left| \frac{1}{r} \Psi^{(0)} \right\rangle - \frac{1}{4} \left\langle \frac{\partial \Psi^{(0)}}{\partial r} \left| \frac{1}{r} \frac{\partial \Psi^{(0)}}{\partial r} \right\rangle \right. \\ & + mm_s \left\langle \frac{\partial \Psi^{(0)}}{\partial r} \left| \frac{1}{r^2} \Psi^{(0)} \right\rangle + \frac{1}{2} m_s B \left\langle \frac{\partial \Psi^{(0)}}{\partial r} \left| \Psi^{(0)} \right\rangle - \frac{1}{4} m^2 \left\langle \Psi^{(0)} \left| \frac{1}{r^3} \Psi^{(0)} \right\rangle \right. \\ & \left. - \frac{1}{16} B^2 \langle \Psi^{(0)} | r \Psi^{(0)} \rangle. \end{aligned}$$

Esta expressão não apresenta termos divergentes.

Os resultados apresentados por eles para as energias não relativística estavam de acordo com os resultados conhecidos e a energia relativística obtida a partir da energia não relativística e da correção de primeira ordem também. Inclusive, para o estado fundamental, coincidindo até a oitava casa decimal para vários valores de campo magnético.

É sabido que uma das dificuldades em estudar o átomo de hidrogênio na presença de um campo magnético é a competição entre as simetrias esférica e cilíndrica. Calbin Stubbins, Kunal Das e Yohannes Shiferaw [20], desenvolveram um método onde utilizando uma base híbrida conseguiram encontrar as energias para campos de baixa intensidade, onde a simetria esférica é dominante, até campos de altíssima intensidade onde a simetria cilíndrica é dominante.

O Hamiltoniano para esse problema em unidades atômicas é dada por

$$H = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{Z}{r} + \frac{\gamma}{2}L_z + \frac{\gamma^2}{8}(x^2 + y^2) \quad (3.78)$$

o Hamiltoniano é invariante sobre a transformação  $z \rightarrow -z$ . O operador  $L_z$  comuta com o Hamiltoniano e o número quântico azimutal é um bom número quântico para esse modelo e as autofunções terão a forma

$$\psi^\pm = [f(z) \pm f(-z)]e^{im\varphi}.$$

Para as funções de base utilizadas no estudo, é interessante utilizar coordenadas parabólicas  $(\eta, \xi, \varphi)$  que permitem encontrar os resultados para campos de baixa e de grande intensidade. Definiram:

$$x = \sqrt{\eta\xi}\cos\varphi, \quad y = \sqrt{\eta\xi}\sen\varphi, \quad z = \frac{1}{2}(\xi - \eta).$$

O Hamiltoniano utilizando as novas coordenadas fica

$$H = -\frac{2\eta}{\eta + \xi}\frac{\partial^2}{\partial\eta^2} - \frac{2}{\eta + \xi}\frac{\partial}{\partial\eta} - \frac{2\xi}{\eta + \xi}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} - \frac{2}{\eta + \xi}\frac{\partial}{\partial\xi} - \frac{1}{2\eta\xi}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - \frac{2Z}{\eta + \xi} + \frac{\gamma}{2i}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\gamma^2}{8}\eta\xi \quad (3.79)$$

e é simétrica com respeito a transformação  $\eta \leftrightarrow \xi$ .

Considerando o caso em que  $\gamma = 0$  a equação (3.78) se reduz ao problema de Coulomb. Para campos de baixa intensidade usaram a base de Coulomb que neste caso fornece bons resultados. Os números quânticos  $n, l, m$  usados em coordenadas esféricas são transformados em  $n_1, n_2, m$  em coordenadas parabólicas onde  $n_1$  e  $n_2$  são inteiros não negativos tal que

$$n = n_1 + n_2 + |m| + 1 \quad (3.80)$$

As autofunções normalizadas para o nível  $E_n$  são

$$\phi_{n_1, n_2, m}(\eta, \xi, \varphi) = \frac{\sqrt{2Z^3}}{n^2} h_{n_1 m} \left( \frac{\eta Z}{n} \right) h_{n_2 m} \left( \frac{\xi Z}{n} \right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad (3.81)$$

onde

$$h_{pm}(x) = \sqrt{\frac{p!}{(|m| + p)!}} L_p^{|m|}(x) x^{|m|/2} e^{-x/2}.$$

As funções  $L_p^{|m|}(x)$  são os polinômios associados de Laguerre. Para assegurar que a paridade fosse definida sobre a transformação  $\eta \leftrightarrow \xi$  utilizaram os estados que seguem abaixo como base:

$$\begin{aligned} \psi_{i,j}^{\pm} = & (\eta\xi)^{\frac{|m|}{2}} L_i^{|m|}(\alpha\eta) L_j^{|m|}(\beta\xi) e^{-\frac{\alpha\eta}{2}} e^{-\frac{\beta\xi}{2}} e^{im\varphi} \\ & \pm (\eta\xi)^{\frac{|m|}{2}} L_i^{|m|}(\alpha\xi) L_j^{|m|}(\beta\eta) e^{-\frac{\alpha\xi}{2}} e^{-\frac{\beta\eta}{2}} e^{im\varphi} \\ & i, j = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (3.82)$$

Quando o campo magnético tem sua intensidade aumentada, a simetria cilíndrica passa a ser mais importante tornando-se necessários mais estados de base como os da equação (3.82) devem ser incluídos. A expectativa deles era que, com a inclusão da exponencial de Landau na base, pudessem ter uma base que fosse válida nos limite de Coulomb e Landau bem como em todo o intervalo de intensidade do campo magnético  $0 \leq B < \infty$ . A base em coordenadas parabólicas pode ser escrita:

$$\psi(\eta, \xi, \varphi) = f(\eta, \xi) e^{-\frac{1}{2}(a\eta + b\xi + c\eta\xi)} e^{im\varphi} \quad (3.83)$$

Onde  $a$ ,  $b$  e  $c$  são parâmetros variacionais. Para garantir a paridade na transformação  $\eta \leftrightarrow \xi$  eles escolheram a base na forma

$$\psi_{i,j}^{\pm} = f_{i,j}(\eta, \xi) e^{-\frac{1}{2}(a\eta+b\xi+c\eta\xi)} e^{im\varphi} \pm f_{i,j}(\eta, \xi) e^{-\frac{1}{2}(a\eta+b\xi+c\eta\xi)} e^{im\varphi} \quad (3.84)$$

Neste estudo, consideraram que

$$f_{i,j}(\eta, \xi) = (\eta\xi)^{|m|/2} \eta^i \xi^j \quad i, j = 0, 1, 2, \dots$$

Onde  $m$  é o número quântico azimutal. Referiram-se a esta base como uma base híbrida.

Quando comparados os valores de energia obtidos usando ambas as bases para campos magnéticos de baixa intensidade, os resultados convergem mostrando que a base híbrida mostra-se aplicável para o limite de Coulomb ( $B \rightarrow 0$ ) e quando a intensidade do campo aumenta até o limite de Landau ( $Z \rightarrow 0$ ), a base híbrida fornece resultados que se mostraram precisos em comparação com os resultados conhecidos, inclusive com maior número de casas decimais e coincidindo totalmente com esses resultados.

Na expectativa de entender o espectro de estrelas de nêutrons e também de anãs brancas, Anand Thirumalai e Jeremy S. Heyl [21] reafirmaram em seu trabalho a necessidade de se ter resultados mais detalhados e precisos dos átomos presentes na atmosfera destes astros em um regime de campos magnéticos intermediários e calcularam as energias para o átomo de hidrogênio e também para o átomo de Hélio. Para tanto, eles partiram do Hamiltoniano para o átomo de hidrogênio representado em coordenadas cilíndricas como:

$$H = \frac{-\hbar}{2m} \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + \mu_B B (l_z + 2S_z) + \frac{e^2 B^2}{8m} \rho^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}|} \quad (3.85)$$

onde  $m$  é a massa do elétron e  $B$  é a intensidade do campo magnético que está orientado ao longo do eixo  $z$ . Eles assumiram que a função de onda para um único elétron tem a forma

$$\Psi = \psi(\rho, z)e^{im\phi}\chi(s) \quad (3.86)$$

Assim, a equação de Schrödinger independente do tempo em unidades do raio de Bohr foi escrita por ele como

$$\left\{ -\left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + \frac{m}{\rho^2} + 2\gamma(m-1) + \gamma^2 \rho^2 - \frac{2Z}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} \right\} \psi(\rho, z) \quad (3.87)$$

$$= \epsilon \psi(\rho, z),$$

onde  $m$  é o número quântico azimutal. Eles definiram:

$$\epsilon = \frac{2E}{\alpha^2 m_e c^2} = \frac{E}{E_\infty},$$

onde  $E_\infty$  é a energia de Rydberg. Definiram também o parâmetro

$$\gamma = \frac{B}{B_0}$$

onde  $B_0$  é o ponto crítico onde acontece a transição para o campo magnético intenso. Ele é definido por

$$B_0 = \frac{2\alpha^2 m_e^2 c^2}{e\hbar},$$

onde  $\alpha$  é a constante de estrutura fina ( $\alpha \approx 1/137$ ).

A transição para campos intensos acontecem com  $\gamma \approx 1$  e a interação do elétron com o núcleo vai ficando menos dominante com o incremento da intensidade do campo magnético. Isto ficou evidenciado por eles ao plotar uma figura da parte real da função de onda que mostra a perda de simetria esférica para campos intensos.

Os resultados foram obtidos resolvendo numericamente a equação (3.85) utilizando cálculos computacionais a partir da técnica de elementos finitos. Resolvendo o problema de autovalores encontraram valores acurados para os estados de baixa energia para diferentes valores do número quântico azimutal  $m$  e para campos magnéticos dentro do intervalo  $10^{-2} \leq \gamma \leq 10$ .

Nakashima e Nakatsuji [22] desenvolveram um método onde puderam calcular as energias para os casos não relativístico e relativístico. Neste, resolveram a equação de Dirac sem e depois considerando os efeitos provocados pelo momento magnético nuclear. Utilizaram o método de livre complemento (FCM - *Free Complement Method*) que havia sido desenvolvido pelos autores em trabalhos anteriores. A fórmula de recorrência obtida converge para a solução exata da equação de Schrödinger. A série, que inclui o Hamiltoniano seja de Schrödinger ou de Dirac, foi escrita por eles como

$$\psi^{(n+1)} = [1 + C^{(n)}g(H - E^{(n)})]\psi^{(n)} \quad (3.88)$$

onde  $n$  é o número de iteração,  $C^{(n)}$  é um parâmetro variacional,  $g$  é uma função para dimensionar a singularidade de Coulomb no Hamiltoniano e  $E^{(n)}$  é o valor esperado para a energia.

Utilizando o método de livre complemento (FCM) obtiveram a função de onda para o caso não relativístico

$$\psi = \sum_j \sum_i c_{i,j} \xi^{a_i} \eta^{b_i} \exp(-k_j \xi - \lambda_j \eta - \omega_j \xi \eta) \cdot (\xi \eta)^{\frac{|m|}{2}} \cdot \exp(im\varphi) \pm \quad (3.89)$$

$$(\xi \leftrightarrow \eta)$$

onde  $a_i$  e  $b_i$  são inteiros não negativos e  $k_j$ ,  $\lambda_j$  e  $\omega_j$  são parâmetros exponenciais. Neste caso  $g = r$ . Usaram coordenadas parabólicas definidas por

$$\xi = r + z \quad \eta = r - z \quad \varphi = \tan^{-1}(y/x)$$

que são apropriadas para campos magnéticos de grande intensidade.

A função de onda para o caso relativístico é representada pelas quatro funções de onda dos espiniores  $\psi = (\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4)^T$  onde

$$\psi_k = \sum_i c_i^{(k)} \xi^{a_i^{(k)}} \eta^{b_i^{(k)}} \quad (3.90)$$

$$/(\xi + \eta)^{d_i^{(k)} + \delta} \exp(-k\xi - \lambda\eta - \omega\xi\eta) \cdot (\xi\eta)^{\frac{|m_k|}{2}} \cdot \exp(im\varphi)$$

$$\pm (-1)^k (\xi \leftrightarrow \eta)$$

onde  $k = 1, \dots, 4$ .  $a_i^{(k)}$ ,  $b_i^{(k)}$  e  $d_i^{(k)}$  representam inteiros não negativos que devem satisfazer a inequação  $a_i^{(k)} + b_i^{(k)} - d_i^{(k)} \geq 0$ . A função  $g$  é neste caso  $g = 1 + r$  e

$m_k = J_z + (-1)^k \cdot 1/2$  onde  $J_z$  representa o momento angular total na direção z. O parâmetro  $\delta$  descreve a sensível singularidade na região de interação entre o núcleo e o elétron.

O método variacional foi utilizado para encontrar os coeficientes e parâmetros nos dois casos. Os resultados encontrados para os níveis de energia obtidos tiveram grande precisão chegando a ter até cem dígitos para alguns valores de campo magnético. Outra constatação importante é que avaliaram a separação hiperfina devido ao momento magnético nuclear. Mostraram também a precisão das energias encontradas através da equação de Dirac incluindo o spin, momento angular e interações spin-orbita para um campo magnético muito intenso considerando o momento magnético nuclear.

## Capítulo 4

### Método e Equações

No capítulo 3 apresentamos diversos métodos onde os níveis de energia para o átomo de hidrogênio sujeito a um campo magnético externo são obtidos. Muitos deles, no entanto, são muito complexos exigindo grande esforço operacional e computacional para obtenção destes resultados. Neste capítulo, vamos propor um método extremamente simples, ainda em desenvolvimento, que nos permitem obter os níveis de energia em conformidade com os métodos anteriormente apresentados.

Para que possamos calcular os níveis de energia do átomo de hidrogênio na presença de um campo magnético externo, vamos obter uma equação de movimento a partir da equação de Hamilton-Jacobi relativística.

A correção relativística para energia pode ser escrita em termos do momento linear como

$$E^2 = c^2(m^2c^2 + p^2). \quad (4.1)$$

Assim, a equação de Hamilton-Jacobi para  $H \equiv E$  [1] torna-se:

$$H^2 = E^2 = c^2(m^2c^2 + p^2). \quad (4.2)$$

e

$$\vec{p}^2 + m^2 c^2 - \frac{E^2}{c^2} = 0. \quad (4.3)$$

Devido a presença de um campo magnético externo temos as seguintes transformações

$$\begin{aligned} \vec{p} &\rightarrow \vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c} \\ E &\rightarrow E - e\phi \end{aligned} \quad (4.4)$$

onde  $\vec{A}$  é o potencial vetor,  $\phi$  é o potencial escalar devido as interações de Coulomb entre o elétron e o núcleo e  $e$  é a carga do elétron. Substituindo as equações (4.4) na equação (4.3) e adotando unidades atômicas com  $\hbar = c = 1$  temos

$$(\vec{p} - e\vec{A})^2 + m^2 - (E - e\phi)^2 = 0 \quad (4.5)$$

e então

$$\vec{p}^2 - e(\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) + (e\vec{A})^2 + m^2 - E^2 + 2Ee\phi - e^2\phi^2 = 0 \quad (4.6)$$

O potencial vetor é definido como na equação (3.1) e sabendo que:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$$

$\vec{A}$  e  $\vec{p}$  comutam e utilizando as propriedades do produto misto temos

$$\vec{p} \cdot \vec{A} = \vec{A} \cdot \vec{p} = \frac{1}{2} B j \quad (4.7)$$

onde  $j$  é o momento angular. Assim, a equação (4.6) assume a seguinte forma

$$\vec{p}^2 - eBj + \frac{e^2 r^2 B^2}{4} + m^2 - E^2 + 2Ee\phi - e^2\phi^2 = 0. \quad (4.8)$$

Como estamos interessados em estudar o átomo de hidrogênio também para campos magnéticos de grande intensidade, onde a simetria cilíndrica predomina sobre a simetria esférica dominante em campos de menor intensidade, é conveniente escrever nossa equação em coordenadas cilíndricas. Assim, o potencial escalar pode ser escrito como:

$$\phi = -\frac{e}{\rho}$$

onde  $\rho = \sqrt{r^2 + z^2}$ . Utilizando ainda a constante de estrutura fina  $\alpha = e^2/\hbar c$  podemos reescrever o potencial escalar em função de  $\alpha$

$$e\phi = -\frac{\alpha}{\rho} \quad (4.9)$$

Substituindo a equação (4.9) na equação (4.8) teremos

$$\vec{p}^2 - eBj + \frac{e^2 r^2 B^2}{4} + m^2 - E^2 - \frac{2E\alpha}{\rho} - \frac{\alpha^2}{\rho^2} = 0 \quad (4.10)$$

Na intenção de simplificar a notação da equação (4.10) vamos definir alguns parâmetros

$$\sigma^2 = m^2 - E^2, \quad (4.11)$$

$$\gamma = \frac{eB}{2}, \quad (4.12)$$

$$\lambda = 2E\alpha \quad (4.13)$$

Assim, a equação (4.10) pode ser reescrita usando estas definições tomando a seguinte forma

$$\vec{p}^2 + \sigma^2 - 2\gamma j + \gamma^2 r^2 - \frac{\lambda}{\rho} - \frac{\alpha^2}{\rho^2} = 0. \quad (4.14)$$

O parâmetro  $\gamma$ , é na verdade definido aproximadamente como  $\gamma \approx B/B_0$ . Como estamos utilizando o sistema de unidades atômicas, onde  $B_0 = 1$ , o parâmetro  $\gamma$  aparece como na equação (4.12). O valor equivalente de  $B_0$  no sistema CGS é  $2,35 \cdot 10^9 \text{G}$ .

Definindo ainda outro parâmetro

$$\sigma'^2 = \sigma^2 - 2\gamma j \quad (4.15)$$

e reescrevendo a equação (4.14) teremos

$$\vec{p}^2 + \sigma'^2 + \gamma^2 r^2 - \frac{\lambda}{\rho} - \frac{\alpha^2}{\rho^2} = 0 \quad (4.16)$$

O momento linear pode ser escrito em coordenadas cilíndricas como

$$\vec{p} = p_r \hat{e}_r + p_z \hat{e}_z + p_\phi \hat{e}_\phi \quad (4.17)$$

Assim, a equação (4.16) toma a seguinte forma

$$p_r^2 + p_z^2 + p_\phi^2 + \sigma'^2 + \gamma^2 r^2 - \frac{\lambda}{\rho} - \frac{\alpha^2}{\rho^2} = 0 \quad (4.18)$$

Podemos escrever a componente  $p_\phi$  do momento em termos da componente do momento angular paralela ao campo magnético já que  $p_\phi$  e  $r$  são perpendiculares. Assim:

$$p_\phi = \frac{j}{r} \quad (4.19)$$

que substituindo na equação (4.18) nos fornece

$$p_r^2 + p_z^2 + \sigma'^2 + \frac{j^2}{r^2} + \gamma^2 r^2 - \frac{\lambda}{\rho} - \frac{\alpha^2}{\rho^2} = 0 \quad (4.20)$$

A função que descreve nosso sistema deve ser então uma função das coordenadas  $r$  e  $z$  ( $\psi = \psi(r, z)$ ). Fazendo as seguintes substituições

$$\begin{aligned} p_r &= \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial r} \\ p_z &= \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial z} \end{aligned} \quad (4.21)$$

na equação (4.20) obtemos

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial r}\right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial z}\right)^2 + \left[\sigma'^2 + \frac{j^2}{r^2} + \gamma^2 r^2 - \frac{\lambda}{\rho} - \frac{\alpha^2}{\rho^2}\right] \psi^2 = 0 \quad (4.22)$$

Verificamos que a função  $\psi$  deve ter a seguinte forma:

$$\psi(r, z) = e^{-\eta\rho - \beta r^2} \sum_{i=0}^n a_i r^i z^i \quad (4.23)$$

onde  $\beta$  e  $\eta$  são parâmetros definidos respectivamente por

$$\beta = \frac{\gamma}{2} \quad \text{e} \quad \eta = \sqrt{-E} \left(1 + \frac{\alpha^2}{8E}\right) \quad (4.24)$$

O parâmetro  $\beta$  possibilita, a partir da solução da equação (4.22) encontrar também as energias para campos magnéticos de baixa intensidade onde a simetria esférica é dominante, ou seja, este parâmetro nos permite transitar onde uma ou outra simetria é dominante bem como nos casos onde elas são igualmente relevantes.

Nosso objetivo é encontrar os níveis de energia e para alcançá-lo vamos utilizar o método variacional. A condição necessária para que possamos encontrar os autovalores de energia é que o funcional deve ser estacionário, o que nos leva a seguinte constatação em relação ao valor esperado da equação de Hamilton-Jacobi

$$\delta\langle H - E \rangle = 0 \quad (4.25)$$

e portanto

$$\delta \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_0^r dr \rho r \left\{ \left( \frac{\partial \psi}{\partial r} \right)^2 + \left( \frac{\partial \psi}{\partial z} \right)^2 + \left[ \sigma'^2 + \frac{j^2}{r^2} + \gamma^2 r^2 - \frac{\lambda}{\rho} - \frac{\alpha^2}{\rho^2} \right] \right\} \psi^2 = 0 \quad (4.26)$$

As condições para que o funcional (4.25) seja estacionário nos levam a seguinte relação

$$\frac{\partial \langle H - E \rangle}{\partial a_i} = 0, \quad i = 1, 2, 3, \dots, n \quad (4.27)$$

portanto, ao diferenciarmos a equação (4.26) em relação aos parâmetros variacionais  $a_i$ , teremos um sistema com  $n$  equações sendo todas iguais a zero.

Como pode ser constatado ao analisar a equação (4.26), que é uma equação diferencial, nosso método é um método semi-clássico que difere da maioria das abordagens apresentadas no capítulo 3 onde tínhamos um operador atuando sob uma função de estado e obtendo os autovalores de energia. Portanto, precisamos obter uma função que seja solução da equação (4.26).

A função que utilizamos como solução para nosso problema é composta por uma expansão polinomial em  $r$  e  $z$  com grau  $n$ , onde  $n$  é um parâmetro de entrada que define como será composta a parte polinomial da nossa função. A

função com a qual obtivemos os melhores resultados foi composta com os expoentes pares para termos que dependem isoladamente de  $r$  e  $z$  dentro do intervalo delimitado por  $n$ , e com expoentes variando de 1 a  $n$  para os termos combinados. Assim, a função assume a seguinte forma:

$$\psi(r, z) = e^{-\eta\rho - \beta r^2} [a_0 + a_1 r^2 + a_2 r^4 + a_3 z^2 + a_4 z^4 + a_5 (rz + rz^2 + rz^3 + \dots + r^5 z^3 + r^5 z^4 + r^5 z^5) + \dots] \quad (4.28)$$

Admitindo que  $\psi(r, z)$  tem a forma mostrada na equação (4.28), substituindo na equação (4.26) e aplicando o método variacional como mostrado na equação (4.27) temos:

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_0^{\infty} dr \rho^2 r^2 F(r, z) \psi^2 \\ &= \sum_{i=0}^n \frac{a_i^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_0^{\infty} dr \rho^2 r^2 F(r, z) \frac{\partial^2 \psi^2}{\partial a_i^2} \\ &\quad + 2 \sum_{0=i < j = n-1}^n a_i a_j \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_0^{\infty} dr \rho^2 r^2 F(r, z) \frac{\partial^2 \psi^2}{\partial a_i \partial a_j} \end{aligned} \quad (4.29)$$

Se  $F(r, z) = b + f(r, z)$  e considerando como exemplo o caso em que  $n = 5$  podemos reescrever a equação (4.29) como:

$$\begin{aligned} I_1 &= \sum_{i=0}^5 \frac{a_i^2}{2} \left[ b \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_0^{\infty} dr \rho^2 r^2 \frac{\partial^2 \psi^2}{\partial a_i^2} + \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_0^{\infty} dr \rho^2 r^2 f(r, z) \frac{\partial^2 \psi^2}{\partial a_i^2} \right] \\ &\quad + 2 \sum_{0=i < j = 4}^5 a_i a_j \left[ b \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_0^{\infty} dr \rho^2 r^2 \frac{\partial^2 \psi^2}{\partial a_i \partial a_j} \right. \\ &\quad \left. + \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_0^{\infty} dr \rho^2 r^2 f(r, z) \frac{\partial^2 \psi^2}{\partial a_i \partial a_j} \right] \end{aligned} \quad (4.30)$$

onde

$$\psi^2 = e^{-2\eta\rho - 2\beta r^2} (a_0^2 + a_1^2 r^4 + a_2^2 r^8 + a_3^2 z^4 + a_4^2 z^8 + \dots + a_5^2 r^{10} z^{10}) \quad (4.31)$$

e

$$F(r, z) = \sigma'^2 + \frac{j^2}{r^2} + \gamma^2 r^2 - \frac{\lambda}{\rho} - \frac{\alpha^2}{\rho^2} \quad (4.32)$$

Temos ainda:

$$\begin{aligned}
 I_2 = & \sum_{i=0}^5 \frac{a_i^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_0^{\infty} dr \rho^2 r^2 \frac{\partial^2}{\partial a_i^2} \left[ \left( \frac{\partial \psi}{\partial r} \right)^2 + \left( \frac{\partial \psi}{\partial z} \right)^2 \right] \\
 & + 2 \sum_{0=i < j=4}^5 a_i a_j \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_0^{\infty} dr \rho^2 r^2 \frac{\partial^2}{\partial a_i \partial a_j} \left[ \left( \frac{\partial \psi}{\partial r} \right)^2 + \left( \frac{\partial \psi}{\partial z} \right)^2 \right]
 \end{aligned} \tag{4.33}$$

Assim,

$$I_1 + I_2 = 0 \tag{4.34}$$

que é devido a aplicação do método variacional como mostrado nas equações (4.25) e (4.27).

A partir da equação (4.34) obtemos um sistema com  $n$  equações sendo todas iguais a zero. Este sistema de equação é resolvido através de um determinante de ordem  $n$  que gera um polinômio de grau  $n$  na energia. Ao ser resolvido este polinômio fornece raízes reais e também raízes imaginárias. Dentre as raízes reais a de menor valor que seja fisicamente aceitável é a energia do estado ligado para uma determinada intensidade de campo magnético.

A resolução do sistema de equações obtido, a construção e solução do polinômio em termos da energia são cálculos executados numericamente através de um programa desenvolvido na linguagem de programação Maple. Este programa é apresentado como apêndice deste trabalho.

Como mostrado ao longo deste capítulo, nosso método é simples, mas sem deixar de ser eficiente o que pode ser comprovado através dos resultados apresentados no próximo capítulo. Além disso, o tempo de cálculo do programa desenvolvido é da ordem de poucos minutos mesmo para campos magnéticos de grande intensidade.

## Capítulo 5

### Resultados e Discussões

Neste capítulo vamos apresentar nossos resultados obtidos através da aplicação do nosso método utilizando cálculos computacionais e compará-los com os resultados presentes na literatura obtidos a partir de diversos métodos. Apresentaremos resultados para diversos valores de campo magnético bem como uma análise de como nossos resultados dependem do número de termos da parte polinomial da nossa função.

A tabela 5.1 apresenta nossos resultados e de vários outros autores para valores de  $\gamma$  variando de  $\gamma = 0$  a  $\gamma = 8$  o que equivale a campos magnéticos com intensidade da ordem de  $10^9$  a  $10^{10}$ G. Fonseca e Silva [26] calcularam as energias utilizando um método semianalítico resolvendo a equação de Schrödinger que foi reescrita utilizando o sistema de coordenadas parabólico-cilíndricas. Cabib, Fabri e Fiorio [27] utilizaram coordenadas polares e uma expansão em termos dos harmônicos esféricos juntamente com um método polinomial iterativo desenvolvido por eles. Santos e Brandi [28] utilizaram uma abordagem dentro do método variacional para encontrar os níveis de energia para campos da ordem de  $10^9$  a  $10^{11}$ G. Brandi havia desenvolvido e utilizado o mesmo para encontrar os níveis de energia para campos da ordem de 0 a  $10^9$ G e neste novo trabalho mudaram as bases da função de onda para encontrar as energias para campos mais intensos (até  $10^{11}$ G). Der-San Chuu e Yu-Kuo Lee [9] obtiveram os resultados utilizando uma aproximação perturbativa e também o

método variacional, separaram o Hamiltoniano para o átomo de hidrogênio em quatro partes como mostramos nos capítulos anteriores. Cohen e Herman [29] utilizaram uma mistura simples do método variacional e da teoria da perturbação de Rayleigh-Schrödinger e um sistema de coordenadas esférico-polares tanto para campos pequenos quanto para campos de grande intensidade. Dai e Chuu [30] introduziram um parâmetro  $(-2\lambda/r)$  que permitiu a separação do Hamiltoniano em duas partes tendo uma as funções do átomo de hidrogênio sem campo magnético como solução e a outra tratada como perturbação que, em conjunto com o método perturbativo variacional, possibilitaram o cálculo dos níveis de energia para campos de diversas intensidades.

$\gamma$	Energias (Ry)						
	Nossos resultados	Ref. [26]	Ref. [27]	Ref. [28]	Ref. [9]	Ref. [29]	Ref. [30]
0	-1.000106567548						
0.001	-1.000106067598						
0.02	-0.9999066611765				-0.998		-0.99980
0.1	-0.9951406161410	-0.995053	-0.99508	-0.77984	-0.995	-0.99505	-0.99504
0.2	-0.9806508336921	-0.980763	-0.98076	-0.85543	-0.981	-0.98076	-0.98058
0.5	-0.8922374844346	-0.894421	-0.89447	-0.83978	-0.894	-0.89406	
1.0	-0.6542683068644	-0.662338	-0.66241	-0.63308	-0.662	-0.65772	-0.64291
2.0	-0.02141938328098		-0.04450	-0.02759	-0.047	-0.01530	-0.02932
3.0	0.7108981716100		0.67087	0.68402	0.671	0.74069	0.75480
4.0	1.496511996485		1.4384	1.4502	1.438	1.56013	1.54921
5.0	2.316234289268		2.2392	2.2510	2.241	2.42143	2.46493
6.0	3.159988949615				3.109		
7.0	4.021737461442				3.495		
8.0	4.897537023564						

Tabela 5.1: Energias do estado fundamental para o átomo de hidrogênio sujeito a um campo magnético uniforme com  $\gamma = 0 - 8.0$ .

Ao compararmos os nossos resultados com os dos outros autores apresentados na tabela 5.1, vemos que existe uma boa acurácia tanto para campos magnéticos menores  $\gamma < 1$  como também para campos onde existe uma equivalência entre as simetrias esférica e cilíndrica ( $\gamma \cong 1$ ). O relativo sucesso obtido para campos menores nos leva a aplicar nosso método para campos maiores inclusive, para campos de altíssima intensidade  $\gamma \gg 1$ , onde a simetria cilíndrica é dominante.

$\gamma$	Energias (Ry)					
	Nossos resultados	Ref. [32]	Ref. [35]	Ref. [36]	Ref. [31]	Ref. [33]
10	6.681100794178		6.5044	6.504406	6.504405	6.50441
20	15.94421901227	15.5927	15.5694	15.569203	15.569209	
50	44.83131655419					
100	93.77067965798	92.5223				92.4204
200	191.8322090732		190.55	190.5469	190.57	
300	289.3150810465	290.3622				
500	481.8412787778					
1000	980.8290721238	991.8777				984.6754
2000	1883.755315575		1981.4600	1981.39104	1985.35	
5000	4239.421053300					
10000	8577.560292325					
50000	32214.42197614					
100000	78685.16707769					

Tabela 5.2: Energias do estado fundamental para o átomo de hidrogênio sujeito a um campo magnético uniforme com  $\gamma = 10 - 10^5$ .

A tabela 5.2 apresenta os resultados obtidos para campos magnéticos mais intensos ( $\gamma > 10$ ), ou seja, intensidade do campo magnético compreendida entre  $10^{10}$  e  $10^{14}$ G. Resultados de outros autores foram também incluídos para a devida comparação. Fonte, Farsaperla, Schiffrer e Stanzial [31] resolveram o problema utilizando coordenadas semiparabólicas e utilizando como base as funções do oscilador harmônico em conjunto com o método variacional. O termo quadrático do campo magnético foi tratado por eles como uma perturbação. Kaschiev, Vinitsky e Vukajlovic [32] utilizaram um sistema de coordenadas esféricas e o método de elemento finito para encontrar os autovalores de energia. Zang e Rustgi [33] utilizaram o método variacional com um conjunto de bases finitas utilizando as funções de base propostas com Chen e Goldman [34]. Guillou e Justin [35] utilizaram uma aproximação onde foi feita uma expansão perturbativa da energia do estado fundamental em uma série de potências em termos do campo magnético. Desenvolveram este método na expectativa de obter bons resultados na região intermediária, onde o campo magnético e o campo coulombiano são igualmente importantes, e também para campos mais intensos ( $\sim 10^{13}$ G). Mostraram que com um número de termos e com um método de soma apropriados, poderiam obter bons resultados utilizando teoria da perturbação para campos intensos. Rösner, Wunner, Herold e Ruder [36] também desenvolveram um método buscando resultados acurados para campos intermediários, a maioria dos trabalhos da época fornecia bons resultados apenas para campos pequenos ou para campos muito grandes. Para campos menos intensos utilizaram uma expansão em termos dos harmônicos esféricos já para campos intensos utilizaram uma expansão em termos dos estados de Landau. Segundo os autores, para campos intermediários os dois métodos podem ser razoavelmente aplicados.

A tabela 5.3 apresenta os valores de energia para alguns valores particulares de campo magnético. Nossa intenção foi mostrar próximo de que valores de  $\gamma$  a energia passa a ser positiva, ou seja, quando o elétron deixa de estar ligado através da interação coulombiana e passa a estar ligado através do campo magnético.

$\gamma$	Energia (Ry)
2.02	-0.007510445469408
2.03	-0.0005422451289784
2.0305	-0.0001935965126537
2.0307	-0.00005413071941656
2.03075	-0.00001926370432653
2.03076	-0.00001229027458890
2.03077	-0.000005316835015097
2.030775	-0.000001830112399726
2.03078	0.000001656612829758
2.0308	0.00001560353710110
2.031	0.0001550747687192
2.032	0.0008524852985152
2.04	0.006435024734355

Tabela 5.3: Energias para valores de  $\gamma$  próximo de onde a energia passa a ser positiva.

A tabela 5.4 mostra como se alteram os valores de energia quando variamos o valor de  $n$  que é o parâmetro que determina como serão os termos da parte polinomial da nossa função conforme mostrado na equação (4.28).

Em comparação com os valores apresentados nas tabelas 5.1, 5.2 e 5.4 vemos que para  $\gamma < 1000$  os resultados convergem e aproximam mais do esperado para maiores valores de  $n$ , ou seja, aumentando o número de termos da parte polinomial da nossa função. Já para  $\gamma \geq 1000$ , mesmo não tendo tantos resultados para comparação, os resultados parecem ser melhores para menores valores de  $n$  exceto para  $n = 1$  onde os resultados divergem completamente do esperado.

$\gamma$	Energias (Ry) para diferentes valores de n				
	n = 1	n = 2	n = 3	n = 4	n = 5
$10^{-5}$	-1.000106564383	-1.000106566758	-1.000106566758	-1.000106567500	-1.000106567499
$10^{-4}$	-0.9999933400821	-1.000106561809	-1.000106561808	-1.000106562551	-1.000106562549
$10^{-3}$	-1.000104210515	-1.000106066662	-1.000106066663	-1.000106067597	-1.000106067598
0.01	-0.9998673926284	-1.000056422399	-1.000056422399	-1.000056576812	-1.000056576812
0.1	-0.9817459707304	-0.9947591352576	-0.9947591352573	-0.9951406161404	-0.9951406161406
1	-0.3469207648024	-0.6195863612277	-0.6195863612277	-0.6542683068644	-0.6542683068643
10	9.589493007432	7.085412882527	7.085412882520	6.681100794158	6.681100794178
50	57.96554464710	46.73813405589	46.73813405618	44.83131655419	44.83131655386
100	119.1492918628	97.47708897462	97.47708896599	93.77067965798	93.77067965540
300	361.6308457814	299.9126173350	299.9126173563	289.3150810510	289.3150810619
500	598.8129390294	499.0050986559	499.0050986759	481.8412787479	481.8412787650
$10^3$	1169.054978575	980.8290722050	980.8290721238	948.3451546811	948.3451547215

Tabela 5.4: Energias para diversos valores de  $\gamma$  e diferentes valores de n.

Ao compararmos nossos resultados com os de outros autores nas tabelas 5.1 e 5.2 vemos que são compatíveis, em alguns casos com convergência de valores para algumas casas decimais. Isto mostra que o nosso método tem boa aplicabilidade já que os valores usados para comparação são já consolidados e servem de referência para todos interessados neste problema.

Importante ressaltar também que nosso método nos permitiu obter bons resultados para toda gama de campos magnéticos, fracos, intermediários e

intensos, sem que tivéssemos que alterar nossa função. Este fato consiste em um diferencial quando comparado a alguns trabalhos presentes na literatura já que muitos não conseguiram obter resultados satisfatórios quando consideraram diversas intensidades de campo desejáveis.

Além da simplicidade do nosso método e da versatilidade com relação às diferentes intensidades de campo magnético, outro diferencial está no tempo de cálculo do programa desenvolvido que mesmo para campos magnéticos muito intensos não é maior do que alguns minutos.

## Capítulo 6

### Conclusões e Perspectivas

Nosso método, quando comparado aos métodos mais tradicionais presentes na literatura como Hartree-Fock, método do elemento finito, teoria da perturbação direta (DPT), aproximações em conjunto com métodos variacionais, *B-splines* e outros que foram citados ao longo do nosso trabalho, é bem mais simples consistindo na resolução de um conjunto de equações que ao ser resolvido numericamente não requer grandes esforços computacionais.

A qualidade dos nossos resultados mostra que nosso método é consistente pois, mesmo sendo aplicado para diferentes intensidades de campo magnético o que está vinculado com a simetria do nosso sistema, eles estão dentro do que era esperado. Dentre os resultados, notamos uma diferença considerável para  $\gamma = 2000$ , mesmo assim esta diferença é em torno de 5% com relação aos resultados obtidos por outros autores.

Na expectativa de buscarmos refinar nossos resultados e também de calcular com boa acuraria os níveis de energia para qualquer intensidade de campo magnético, propomos como perspectiva de continuação do trabalho melhorar nossa função, tanto nos parâmetros das exponenciais que estão ligados ao tipo de simetria relativa à intensidade do campo magnético, quanto na parte polinomial, ou seja, quantos termos são suficientes e como combinar estes termos com relação aos expoentes de  $r$  e  $z$  melhorando com isso cada vez mais nossos resultados.

Uma das aplicações mais importante do nosso problema é no campo da astrofísica onde já foi comprovada a existência de campos magnéticos muito intensos. Esta constatação e a possibilidade de interação dos nossos estudos neste campo nos motivam a procurar melhorar nossos resultados para campos magnéticos mais intensos comuns nestes sistemas, campos estes da ordem de  $10^{12}$  a  $10^{16}$ G. Poderemos ainda incluir outros fatores como, por exemplo, investigar que alterações teríamos nos níveis de energia devido a presença de um campo gravitacional muito intenso o que é comum em vários sistemas estudados em astrofísica.

## Referências Bibliográficas

1. A. L. A. Fonseca, D. L. Nascimento. New Approach to Researches in Relativistic Quantum Chemistry using Hamilton-Jacobi Equation. Quantum Chemistry Research Trends. Nova York: Nova Science Publishers; 2007. p.173-204.
2. F. Caruso, V. Oguri. A desconstrução do Átomo: Algumas Evidência do Século XIX. Física Moderna: Origens Clássicas e Fundamentos Quânticos. Rio de Janeiro: Elsevier; 2006. p.233-7.
3. H. M. Reese. The zeeman effect. Science. 1990 Aug; 293-7.
4. J. Simola, J. Virtamo. Energy levels of hydrogen atoms in a strong magnetic field. J. Phys. B. 1978 Feb;11(19): 3309-22.
5. K. A. U. Lindgren, J. T. Virtamo. Relativistic hydrogen atom in a strong magnetic field. J. Phys. B. 1979 Mar; 12(21): 3465-72.
6. S. H. Patil. The redshift of hydrogen lines in a strong magnetic Field. J. Phys. A. 1981 Mar; 14(1981): 2251-8;
7. M. Robnik, E. Schrüfer. Hydrogen atom in a strong magnetic field: calculation of the energy levels by quantising the normal form of the regularised Kepler Hamiltonian. J. Phys. A. 1985 jul; 18(1985): L853-L859.

8. S. P. Goldman, Z. Chen. Generalized relativistic variational calculations for hydrogenic atoms in arbitrary magnetic fields. *Phys. Rev. Let.* 1991 Sep; 67(11): 1403-6.
9. D. S. Chuu, Y. K. Lee. Hydrogen atom in a high magnetic field. *Phys. Rev. A.* 1993 Dec; 48(6): 4175-81.
10. J. H. Wang, C. S. Hsue. Calculation of the energy levels of a hydrogen atom in a magnetic field of arbitrary strength by using B splines. *Phys. Rev. A.* 1995 Dec; 52(6): 4508-14.
11. A. Rutkowski, R. Kozłowski. Double-perturbation approach to the relativistic hydrogenic atom in a static and uniform magnetic field. *J. Phys. B.* 1997 Jan; 30(1997): 1437-48.
12. V. M. Villalba, R. Pino. Analytic solution of a relativistic two-dimensional hydrogen-like atom in a constant magnetic field. *Phys. Let. A.* 1998 Jan; 238(1998): 49-53.
13. V. M. Villalba, R. Pino. Energy spectrum of a relativistic two-dimensional hydrogen-like atom in a constant magnetic field of arbitrary strength. *Phys. E.* 2001; 10(2001): 561-8.
14. M. Robnik, V. G. Romanovski. Two-dimensional hydrogen atom in a strong magnetic field. *J. Phys. A.* 2003 Jul; 36(2003): 7923-51.
15. M. Robnik, V. G. Romanovski. The difference equation related to the problem of the hydrogen atom in a strong magnetic field. *ETNA.* 2007; 27: 163-76.
16. A. Poszwa, A. Rutkowski. Highly accurate calculations for hydrogenic atoms in a magnetic field of arbitrary strength. *Phys. Rev. A.* 2001 Mar; 63(043418): 1-4.
17. A. Poszwa, A. Rutkowski. Hydrogen atom in a strong magnetic field. II. Relativistic corrections for low-lying excited states. *Phys. Rev. A.* 2004 Feb; 69(023403); 1-6.

18. A. Poszwa, A. Rutkowski. Relativistic corrections for a two-dimensional hydrogen-like atom in the presence of a constant magnetic field. *Phys. Scr.* 2009 May; 79(2009): 1-4.
19. M. G. Dimova, M. S. Kaschiev, S. I. Vinitsky. The Kantorovich method for high-accuracy calculations of a hydrogen atom in a strong magnetic field: low-lying excited states. *J. Phys. B.* 2005 Jun; 38(2005): 2337-52.
20. C. Stubbins, K. Das, Y. Shiferaw. Low-lying energy levels of the hydrogen atom in a strong magnetic field. *J. Phys. B.* 2004 May; 37(2004): 2201-9.
21. A. Thirumalai, J. S. Heyl. Hydrogen and helium atoms in strong magnetic fields. *Phys. Rev. A.* 2009 Jan; 79(012514): 1-13.
22. H. Nakashima, H. Nakatsuji. Solving the Schrödinger and Dirac equations for a hydrogen atom in the universe's strongest magnetic fields with the free complement method. *ApJ.* 2010 Dec; 725: 528-33.
23. J. Xi, X. He, B. Li. Energy levels of the hydrogen atom in arbitrary magnetic fields obtained by using B-splines basis sets. *Phys. Rev. A.* 1992 Nov; 46(9): 5806-11.
24. C. de Boor. *A practical Guide to Splines.* New York: Springer; 2001. p. 87-142.
25. C. W. A. Fletcher. *Computational Galerkin Methods.* New York: Springer; 1984.
26. O. L. Silva, A. L. A. Fonseca. Different approach to the Zeeman effect: Application to the hydrogen ground state. *Phys. Rev. A.* 1994 Nov; 50(5): 4383-5.
27. D. Gabib, E. Fabri, G. Fiorio. The ground state of the exciton in a magnetic field. *Solid State Communications.* 1971 Jun; 9: 1517-20.
28. R. R. dos Santos, H. S. Brandi. Addendum to "Hydrogen atoms in strong magnetic fields". *Phys. Rev. A.* 1976 May; 13(5): 1970-74.
29. M. Cohen, G. Herman. The hydrogen atom in strong magnetic fields. *J. Phys. B.* 1981 April; 14: 2761-7.

30. Chang-Ming Dai, Der-San Chuu. Shallow donor impurity states of a semiconductor in a uniform magnetic field. *Physica B*. 1991 March; 172: 445-51.
31. G. Fonte, P. Farsaperla, G. Schiffrer, D. Stanzial. Quadratic Zeeman effect for hydrogen: A method for rigorous bound-state error estimates. *Phys. Rev. A*. 1990 Jun; 41(11):5807-13.
32. M. S. Kaschiev, S. I. Vinitzky, F. R. Vukajlovic. Hydrogen atom  $H e H_2^+$  molecule in strong magnetic fields. *Phys. Rev. A*. 1980 Aug; 22(2): 557-9.
33. J. X. Zang e M. L. Rustgi. Energy levels of a hydrogen atom In a magnetic field. *Phys. Rev. A*. 1994 Jul; 50(1):861-2.
34. Z. Chen, S. P. Goldman. Relativistic and nonrelativistic finite-basis-set calculations of low-lying levels of hydrogenic atoms in intense magnetic fields. *Phys. Rev. A*. 1992 Feb; 45(3): 1722-31.
35. J. C. Le Guillou, J. Z. Justin. The Hydrogen Atom in Strong Magnetic Fields: Summation of the Weak Field Series Expansion. *Ann. Phys.* 1983; 147: 57-84.
36. W. Rösner, G. Wunner, H. Herold, H. Ruder. Hydrogen atoms in arbitrary magnetic fields: I. Energy levels and wavefunctions. *J. Phys. B*. 1984; 17: 29-52.

## Apêndice A

### Programa: Cálculo dos Níveis de Energia

Neste apêndice expomos nosso programa desenvolvido com base na linguagem do programa Maple. No programa temos como dados de entrada a intensidade do parâmetro  $\gamma$ , definido no programa como  $g0$ , relacionado com a intensidade do campo magnético e  $nb$  ( $n$ ) que determina o grau máximo da parte polinomial da nossa função. Definimos o parâmetro  $g0$  igual a 1.0 e  $nb$  igual a 4 como exemplo.

```
> #Hydrogen atom in a magnetic field  
> restart;
```

```
> g0:=1.0; nb:=4; (g0 é o valor de entrada do campo e nb define o grau  
máximo da expansão polinomial)
```

```
g0 := 1.0
```

```
nb := 4
```

```
> Digits := 13: af:=1/137: j:=0:  
> b:=g0/2; b1:=g0/4: rho:=sqrt(r^2+z^2);  
b := 0.500000000000000
```

```
 $\rho := \sqrt{r^2 + z^2}$ 
```

```
> En:=-1.0:  
> #d:=sqrt(-En)*(1+af^2/8*En);  
> d := sqrt(-En)*(1 + af^2/8*En);  
d := 0.9999933400821
```

> R:=(r,z)->exp(-d\*rho-b\*r^2);

$$R := (r, z) \rightarrow e^{-d\rho - br^2}$$

>

> lm:=0;

$$lm := 0$$

> Q1:=a[0]; k:=0;

$$Q1 := a_0$$

$$k := 0$$

> for i from 1 to nb do  
 if (type(i,even)) then  
 k:=k+1;  
 Q1:=Q1+a[k]\*r^(i);  
 end if;  
 end do;  
 > Q1;

$$a_0 + a_1 r^2 + a_2 r^4$$

> Q2:=0; kz:=k;

$$Q2 := 0$$

$$kz := 2$$

> for i from 1 to nb do  
 if (type(i,even)) then  
 kz:=kz+1;  
 Q2:=Q2+a[kz]\*z^(i);  
 end if;  
 end do;  
 > Q3:=0; ll:=kz+1;

$$Q3 := 0$$

$$ll := 5$$

> Q2;n1:=nb-1;

$$a_3 z^2 + a_4 z^4$$

$$n1 := 3$$

> for n from 1 to nb do  
 for i from 1 to nb do  
 Q3:=Q3+a[ll]\*r^(n)\*z^(i);  
 end do;  
 end do;

> Q3;

$$\begin{aligned} & a_5 r z + a_5 r z^2 + a_5 r z^3 + a_5 r z^4 + a_5 r^2 z + a_5 r^2 z^2 + a_5 r^2 z^3 + a_5 r^2 z^4 \\ & + a_5 r^3 z + a_5 r^3 z^2 + a_5 r^3 z^3 + a_5 r^3 z^4 + a_5 r^4 z + a_5 r^4 z^2 \\ & + a_5 r^4 z^3 + a_5 r^4 z^4 \end{aligned}$$

```
>
> lm:=ll-1;
```

$lm := 4$

```
> Q:=Q1+Q2+Q3;
```

$$\begin{aligned}
 Q := & a_0 + a_1 r^2 + a_2 r^4 + a_3 z^2 + a_4 z^4 + a_5 r z + a_5 r z^2 + a_5 r z^3 \\
 & + a_5 r z^4 + a_5 r^2 z + a_5 r^2 z^2 + a_5 r^2 z^3 + a_5 r^2 z^4 + a_5 r^3 z \\
 & + a_5 r^3 z^2 + a_5 r^3 z^3 + a_5 r^3 z^4 + a_5 r^4 z + a_5 r^4 z^2 + a_5 r^4 z^3 \\
 & + a_5 r^4 z^4
 \end{aligned}$$

```
> Q;
```

$$\begin{aligned}
 & a_0 + a_1 r^2 + a_2 r^4 + a_3 z^2 + a_4 z^4 + a_5 r z + a_5 r z^2 + a_5 r z^3 + a_5 r z^4 \\
 & + a_5 r^2 z + a_5 r^2 z^2 + a_5 r^2 z^3 + a_5 r^2 z^4 + a_5 r^3 z + a_5 r^3 z^2 \\
 & + a_5 r^3 z^3 + a_5 r^3 z^4 + a_5 r^4 z + a_5 r^4 z^2 + a_5 r^4 z^3 + a_5 r^4 z^4
 \end{aligned}$$

```
> NN:=lm-1;
```

$NN := 3$

```
> n:=lm;
```

$n := 4$

```
>
> V:= proc(r,z)
global Q;
1*Q
end;
>
> P:=(r,z)->V(r,z);
```

$V := \text{proc}(r, z) \text{ global } Q, Q \text{ end proc}$

$P := (r, z) \rightarrow V(r, z)$

```
>
>
> F:=(r,z)->R(r,z)*P(r,z); #F(r,z):=F(r,z);
```

$F := (r, z) \rightarrow R(r, z) P(r, z)$

Derivadas em z,r.

```
> Rr:=(r,z)->diff(R(r,z),r); Pr:=(r,z)->diff(P(r,z),r);
> Fr:=(r,z)->R(r,z)*Pr(r,z)+P(r,z)*Rr(r,z);
```

$Fr := (r, z) \rightarrow R(r, z) Pr(r, z) + P(r, z) Rr(r, z)$

```
> Rz:=(r,z)->diff(R(r,z),z); Pz:=(r,z)->diff(P(r,z),z);
> Fz:=(r,z)->R(r,z)*Pz(r,z)+P(r,z)*Rz(r,z);
```

$Fz := (r, z) \rightarrow R(r, z) Pz(r, z) + P(r, z) Rz(r, z)$

```
> for i from 0 to n do
```

```

for k from 0 while k <=i do
Iik:=diff(Fr(r,z)*diff(Fr(r,z),a[i])+Fz(r,z)*diff(Fz(r,z),a[i
])+ (j*g0+j^2/r^2+g0^2*r^2/4.-2/rho-
af^2/rho^2)*F(r,z)*diff(F(r,z),a[i]),a[k]):
IEik:=diff(F(r,z)*diff(F(r,z),a[i]),a[k]):
Izr:=Int(Int(r*Iik,z=-infinity..infinity),r=0..infinity)-
E*(1+af^2*E)*Int(Int(r*IEik,z=-
infinity..infinity),r=0..infinity)-
af^2*E*Int(Int(r*IEik/rho,z=-
infinity..infinity),r=0..infinity):
N[i,k]:=evalf(2*Izr): N[k,i]:=N[i,k]:
if (i=k) then print(i) end if;
end do:
end do:
>

```

0  
1  
2  
3  
4

Derivadas de IF em relação a a1 e a2.

```

> for s from 0 to n do y[s]:=sum(a[q]*N[s,q], q=0..n):
end do:
> er:=1e-40:

```

Matriz do sistema linear I1=0; I2=0; ou Ax=b.

```

> with(LinearAlgebra):
sys := [seq(y[i]=er,i=0..n)]:
var := [seq(a[i],i=0..n)]:
(A,b2) := GenerateMatrix( sys, var ):
> B := GenerateMatrix( sys, var, augmented=true ):
>
>
> poly := Determinant(A):
>

```

Raízes reais da equação poly=0.

```

> use RealDomain in S:=solve(poly =0.,E) end;
S:= 1.088005658689, 1.761674255635, 2.675700904374,
8.207048087327, -0.6542683068644, -18651.67658715

```

O polinômio de grau  $n$  é resolvido em relação a  $E$  e fornece  $n$  raízes, onde somente as reais foram listadas. Como são soluções matemáticas nem todas tem significado físico, portanto temos que interpretar o resultado de acordo com o problema físico estudado, no nosso exemplo obtivemos:

$$S := 1.088005658689, 1.761674255635, 2.675700904374, \\ 8.207048087327, \boxed{-0.6542683068644}, -18651.67658715$$

Os valores positivos para a energia não tem significado físico, pois para esta intensidade de campo temos um estado ligado. Para os resultados negativos apenas o que está em destaque é aceitável já que o outro diverge totalmente do que era esperado e somente o quinto valor tem significado físico, portanto é este o valor para a energia do átomo de hidrogênio em presença do campo magnético ( $\gamma = 1.0$ ) que é a solução aceita.