



Ministério da Educação – Brasil  
Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri – UFVJM  
Minas Gerais – Brasil  
Revista Vozes dos Vales: Publicações Acadêmicas  
Reg.: 120.2.095 – 2011 – UFVJM  
ISSN: 2238-6424  
QUALIS/CAPES – LATINDEX  
Nº. 17 – Ano IX – 05/2020  
<http://www.ufvjm.edu.br/vozes>

## O uso do método de diferenças finitas na resolução da equação de Schrödinger independente do tempo

Prof. Dr. Geraldo Moreira da Rocha Filho  
Docente do Instituto, Ciência Engenharia e Tecnologia – ICET  
Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri - UFVJM - Brasil  
<http://lattes.cnpq.br/2334418891428281>  
E-mail: [geraldo.rocha@ufvjm.edu.br](mailto:geraldo.rocha@ufvjm.edu.br)

Acson Rangel Nunes  
Bacharel em Ciência e Tecnologia pela UFVJM – Teófilo Otoni/MG – Brasil.  
Graduando em Engenharia Civil – UFVJM - Teófilo Otoni/MG - Brasil  
<http://lattes.cnpq.br/2488342042550432>  
E-mail: [acsonrangel@hotmail.com](mailto:acsonrangel@hotmail.com)

Gutchers Gonçalves da Luz  
Graduando em Ciência e Tecnologia – UFVJM - Teófilo Otoni/MG – Brasil  
<http://lattes.cnpq.br/7010891844140665>  
E-mail: [gutchers7@hotmail.com](mailto:gutchers7@hotmail.com)

**Resumo:** A teoria desenvolvida por Schrödinger fornece a lei do movimento ondulatório para qualquer partícula microscópica. Entretanto, soluções analíticas exatas da equação de Schrödinger são conhecidas para poucos sistemas físicos como, por exemplo, a partícula livre, o oscilador harmônico e o átomo de hidrogênio. No presente artigo é apresentado o método de diferenças finitas para obter o espectro de energia e as respectivas autofunções da equação de Schrödinger independente do tempo. Primeiramente, aplicou-se o método ao oscilador harmônico

e comparou-se os resultados obtidos com aqueles já bem conhecidos e determinados analiticamente. Em seguida, aplicou-se o método a uma partícula submetida a um poço de potencial não linear.

**Palavras-chave:** Equação de Schrödinger, Diferenças Finitas, Potencial Não linear.

## 1. Introdução

O desenvolvimento da teoria conhecida como mecânica quântica passou por diversos estágios, até se chegar aos conceitos conhecidos atualmente. Os primeiros trabalhos que abordavam a quantização de energia foram publicados em 1900. Com o passar dos anos a teoria quântica se mostrou relevante e com isso surgiu a necessidade de desenvolver “uma nova teoria física fundamental, incompatível com a física clássica” (SCHMIDT, 2008).

Em meados de 1920, com o auxílio de estudos realizados por outros pesquisadores, Schrödinger formulou sua teoria, a equação de Schrödinger, e esta mostrou sua importância para a mecânica quântica propriamente dita (SCHMIDT, 2008).

A teoria desenvolvida por Schrödinger fornece a lei de movimento ondulatório para qualquer partícula microscópica. A equação Schrödinger respeita todas as condições iniciais necessárias para a obtenção da equação de onda da mecânica quântica (EISBERG e RESNICK, 1979).

Entretanto, soluções analíticas exatas da equação de Schrödinger são conhecidas para poucos sistemas físicos como, por exemplo: a partícula livre, o oscilador harmônico e o átomo de hidrogênio. O discente mais atento rapidamente percebe que buscar soluções analíticas para a equação de Schrödinger não é um trabalho trivial (MONERAT *et al.*, 2010). Apresentam-se métodos aproximados, e dentre os mais comumente encontrados na maioria das ementas de mecânica quântica estão o método WKB (GRIFFITHS, 1995, apud MONERAT *et al.*, 2010) e as teorias de perturbação independente e dependente do tempo (GREINER, 2001, apud MONERAT *et al.*, 2010).

Os autovalores de energia e as autofunções de um sistema quântico também podem ser obtidos através de métodos numéricos de diferenças finitas. Em 2010,

Monerat e colaboradores (MONERAT *et al.*, 2010) aplicaram o método de diferenças finitas a três sistemas físicos: o oscilador harmônico, o oscilador anarmônico quártico e o potencial linear. Para cada um destes sistemas eles calcularam os dez níveis de energia mais baixos, bem como seus respectivos autoestados.

No presente artigo, foi usado o método de diferenças finitas para obter o espectro de energia e suas respectivas autofunções. Primeiramente ele foi aplicado ao oscilador harmônico unidimensional. E os resultados obtidos através do método foram comparados com aqueles já conhecidos e determinados analiticamente (EISBERG e RESNICK, 1979). A seguir, o método de diferenças finitas foi aplicado a outro sistema físico: uma partícula submetida a um potencial não linear unidimensional.

O presente artigo está dividido nas seguintes seções. Na seção 2, são apresentadas algumas considerações sobre a equação de Schrödinger. Na seção 3, o método de diferenças finitas é apresentado em detalhes. Na seção 4 - Resultados e discussão - o método de diferenças finitas é aplicado ao caso do oscilador harmônico, sendo calculado seus dez níveis mais baixos de energia. Em seguida, o resultado numérico obtido é comparado com o resultado analítico encontrado na literatura. Na mesma seção, o método de diferenças finitas, também, é aplicado ao caso de uma partícula submetida a um potencial não linear unidimensional. Finalmente, na seção 5, é apresentada a conclusão do nosso trabalho.

## 2. A equação de Schrödinger

A mecânica quântica tem a função de onda  $\Psi(\vec{r}, t)$ , como principal objeto para descrever as propriedades de sistemas físicos. A forma da função de um dado sistema físico dependerá da função de Hamilton ou hamiltoniana do sistema. De um modo geral, a hamiltoniana de uma partícula é da forma (MONERAT *et all*, 2010),

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad (1)$$

em que  $\vec{p}$  corresponde ao momento canonicamente conjugado à posição da partícula,  $\vec{r}$ ,  $m$  é a massa da partícula e  $V(\vec{r})$  é a energia potencial desta sob a ação de um campo externo independente do tempo. Em sua versão unidimensional, temos

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x). \quad (2)$$

Elevando ao grau de operadores a posição  $x$ , seu momento canônico  $p_x$  e a função de Hamilton  $H$ , temos na representação de Schrödinger unidimensional (MONERAT *et al*, 2010) a seguinte correspondência

$$H \rightarrow i \frac{d}{dt}; \quad p_x = -i \frac{d}{dx}, \quad (3)$$

Em que fizemos  $\hbar = 1$ . Assim, obtemos a equação de Schrödinger, que governa a dinâmica do sistema quântico

$$H\Psi(x,t) = i \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}. \quad (4)$$

ou

$$\left( -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Psi(x,t) = i \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}. \quad (5)$$

Utilizando o método de separação de variáveis, fazendo  $\Psi(x,t) = \varphi(x)\xi(t)$ , obtendo assim as equações

$$-\frac{1}{2m\varphi(x)} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x) = i \frac{1}{\xi(t)} \frac{d\xi(t)}{dt}. \quad (6)$$

Na qual introduz-se a constante de separação  $E$ . A solução da parte temporal é  $\xi(t) \propto e^{-iEt}$ ; a equação para a parte espacial  $\varphi(x)$  é da forma

$$\left( -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \varphi(x) = E\varphi(x), \rightarrow$$

$$H\varphi(x) = E\varphi(x), \quad (7)$$

denominada equação de Schrödinger independente do tempo, que equivale a uma equação de autovalores para o operador hamiltoniano  $H$ . Os estados estacionários do sistema físico são representados pelas autofunções  $\varphi_\alpha(x)$  do operador hamiltoniano, ou seja, funções que satisfazem

$$H\varphi_\alpha(x) = E\varphi_\alpha(x). \quad (8)$$

Os autovalores  $E_\alpha$  correspondem aos níveis de energia do sistema. Uma solução da equação de Schrödinger pode ser obtida através da superposição (combinação linear) destas soluções,

$$\Psi(x,t) = \sum_{\alpha=0}^N C_\alpha \varphi_\alpha(x) e^{-iE_\alpha t}, \quad (9)$$

em que  $C_\alpha$  são constantes arbitrárias, tal que  $\Psi(x,t)$  seja normalizada.

Dependendo da forma do potencial  $V(x)$ , soluções analíticas para a equação de Schrödinger não são conhecidas. Nesses casos, métodos numéricos são necessários.

### 3. O método de diferenças finitas

O método de diferenças finitas, essencialmente, é usado para transformar uma “equação diferencial ordinária ou parcial, linear ou não, em um sistema de equações algébricas”, onde as incógnitas são os valores da função em cada ponto de um conjunto discreto de pontos igualmente espaçados (denominados *reticulados*) obtido pela discretização da variável de integração  $x$ . O método apresenta certa ambiguidade, na medida em que, por construção, as derivadas podem ser aproximadas por diferenças finitas ascendente, descendente ou centrada, em relação ao ponto desejado (MONERAT *et al.*, 2010). Considerando a discretização mostrada na Figura 1, na qual o intervalo de interesse  $[x_0, x_{n+1}]$  é particionado em  $n+1$  sub-intervalos de mesma amplitude  $h = x_{i+1} - x_i$ . Os pontos  $x_0$  e  $x_{n+1}$  correspondem aos pontos extremos do intervalo.



Figura 1 - Reticulado obtido ao discretizarmos a variável de integração  $x$ . Fonte: MONERAT *et al.*, 2010.

Inicialmente deve-se expandir uma função  $f(x)$  em série de Taylor em torno do ponto  $x_i$  do reticulado, até o termo em 2ª ordem, obtendo a equação (10):

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{1}{2} f''(x_i)h^2 + O(h^3), \quad (10)$$

em que  $f'(x)$  e  $f''(x)$  são as derivadas ordinárias de primeira e segunda ordem, respectivamente, da função  $f(x)$  em relação à coordenada  $x$ . Levando em

consideração esta série somente até o termo de primeira ordem (MONERAT *et al.*, 2010), obtém-se

$$f'_{A}(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h}, \quad (11)$$

que é denominada diferenciação ascendente e é representada pelo sub-índice *A*. Por outro lado, também é possível escrever

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - f'(x_i)h + \frac{1}{2} f''(x_i)h^2 + O(h^3), \quad (12)$$

o que conduz, após proceder o mesmo truncamento, a equação

$$f'_{D}(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h}, \quad (13)$$

que é conhecida como *diferenciação descendente* e é representada aqui pelo sub-índice *D*. Observe que o deslocamento da variável, neste caso, é  $x_i - x_{i-1} = h$ . Subtraindo a equação (10) da equação (12) obtém-se a fórmula para a diferenciação centrada (MONERAT *et al.*, 2010),

$$f'_{C}(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2h}, \quad (14)$$

Somando as equações (10) e (12) (nas quais os termos de ordem superiores aos de segunda ordem são desprezados), chega-se a expressão para a derivada segunda centrada, que tem a forma (MONERAT *et al.*, 2010),

$$f''_{C}(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1}))}{h^2}, \quad (15)$$

O mesmo resultado pode ser obtido notando-se que

$$f''_c(x_i) = \frac{f'_A(x_i) - f'_D(x_i)}{h}, \quad (16)$$

a substituição das equações (11) e (13) na equação (16), conduz novamente à equação (15). Os erros cometidos nestas aproximações são da ordem de  $O(h^2)$ . Estes procedimentos podem ser facilmente estendidos para a determinação de expressões ascendentes, descendentes e centradas de derivadas de qualquer ordem (CHAPRA e CANALE, 1988, apud MONERAT *et al.*, 2010).

Aplicando a equação (16) na equação (6) para determinado ponto  $x_i$  do reticulado, obtemos,

$$-\frac{1}{2m} \left[ \frac{\varphi_\alpha(x_{i+1}) - 2\varphi_\alpha(x_i) + \varphi_\alpha(x_{i-1}))}{h^2} \right] + V(x_i)\varphi_\alpha(x_i) = E_\alpha\varphi_\alpha(x_i). \quad (17)$$

Fazendo  $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ , podemos aplicar a equação (17), desde o ponto  $x_i$  até o ponto  $x_n$ . O resultado é um sistema algébrico de  $n$  equações com  $n+2$  incógnitas – os valores da função  $\varphi_\alpha$  nos pontos  $(x_0, x_1, \dots, x_{n+1})$ . Entretanto, os valores de  $\varphi_\alpha$  nestes pontos são determinados pelas condições de contorno, que aqui serão escolhidas como

$$\varphi_\alpha(x_0) = \varphi_\alpha(x_{n+1}) = 0. \quad (18)$$

Esta condição de contorno é compatível com a busca de autofunções localizadas de sistemas com potenciais finitos (como as autofunções correspondendo a níveis discretos de energia de um poço de potencial, por exemplo) desde que o intervalo considerado seja suficientemente grande em relação à região classicamente permitida, onde as autofunções são sensivelmente não nulas.

Com esta informação adicional, o que obtemos finalmente é um sistema de equações algébricas com solução única. Este sistema pode ser convenientemente expresso na forma matricial, se escrevermos a função  $\varphi_\alpha(x)$  como um vetor

$$\varphi_\alpha(x) = \begin{pmatrix} \varphi_\alpha(x_1) \\ \varphi_\alpha(x_2) \\ \vdots \\ \varphi_\alpha(x_n) \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Com isso, a equação (17) assume a forma

$$\begin{pmatrix} F(x_1) & -\frac{1}{2mh^2} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\frac{1}{2mh^2} & F(x_2) & -\frac{1}{2mh^2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2mh^2} & F(x_3) & -\frac{1}{2mh^2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & -\frac{1}{2mh^2} & F(x_n) & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_\alpha(x_1) \\ \varphi_\alpha(x_2) \\ \vdots \\ \varphi_\alpha(x_n) \end{pmatrix} = E_\alpha \begin{pmatrix} \varphi_\alpha(x_1) \\ \varphi_\alpha(x_2) \\ \vdots \\ \varphi_\alpha(x_n) \end{pmatrix}, \quad (20)$$

Em que  $F(x) = \frac{1}{mh^2} + V(x)$ . Observamos que a matriz  $n \times n$  é real e simétrica, e portanto diagonalizável; é garantida a existência de uma base de autoestados.

É claro que, numericamente, sempre utilizamos um valor finito para  $n$ , o que resulta em um número finito  $\alpha_{max}$  de autoenergias e seus respectivos autoestados. Isto porque, ao dividirmos o intervalo utilizando  $n$  pontos, gera-se uma matriz  $n \times n$ , cuja equação característica é uma equação de grau  $n$ , cujas  $n$  raízes são os  $n$  autovalores de valor mais baixo. No caso específico de sistemas não degenerados, temos  $\alpha_{max} = n - 1$ , com  $\alpha$  variando de 0 até  $\alpha_{max}$ . Quanto mais refinado for o esquema de discretização, ou seja, quanto maior for o número de pontos  $n$  do reticulado e menor o seu espaçamento  $h$ , conforme exibido na Figura 1, mais preciso será o cálculo dos autovalores de energia (MONERAT *et al*, 2010). Obviamente, este refinamento está condicionado às limitações computacionais (isto é, erros de truncamento e arredondamento, quantidade de memória disponível).

## 4. Resultados e discussão

No presente trabalho, o método exposto anteriormente foi aplicado a dois sistemas físicos; o (i) oscilador harmônico e em seguida, (ii) uma partícula submetida a um potencial não linear. Esse método numérico é suficientemente simples para ser introduzido, permitindo a obtenção de resultados tanto qualitativamente corretos como de alta precisão quantitativa. O algoritmo para o método mencionado aqui foi implementado em linguagem FORTRAN e o código-fonte está disponível no trabalho de Monerat e colaboradores (MONERAT *et al.*, 2010). Também foi considerado um reticulado com  $n=1500$  pontos e distância entre pontos adjacentes  $h=0.013333\dots$

Para o oscilador harmônico foram reproduzidos (MONERAT *et al.*, 2010) os 10 níveis baixos de energia, bem como seus respectivos autoestados para o sistema. Em seguida, foi empregado o método para outro sistema: o potencial não-linear. Os resultados são apresentados a seguir.

### 4.1 O oscilador harmônico

Um questionamento que pode surgir é quanto à precisão do método. Para elucidar esta questão, fora aplicado o método de diferenças finitas ao “problema da quantização do oscilador harmônico” (MONERAT *et al.*, 2010), e com isso determinou-se numericamente o seu espectro de energia. “O espectro de energia do oscilador harmônico é conhecido na literatura, o que permitirá” comparar o resultado numérico com o analítico e dessa forma avaliar a precisão do método. O oscilador harmônico é caracterizado por um potencial na forma

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2, \quad (21)$$

em que  $k$  é uma constante arbitrária.

O operador hamiltoniano para oscilador harmônico conduz à equação de Schrödinger estacionária (6) com um potencial na forma da equação (20), sendo

$$F(x) = \frac{1}{m\hbar^2} + \frac{1}{2}kx^2. \text{ E também foi usado } k=m=1.$$

Espectro de energia do oscilador harmônico			
$\alpha$	$E_\alpha = \omega\hbar(\alpha + 1/2)$	$E_\alpha^{numerico}$	$\delta E = E_\alpha - E_\alpha^{numerico}$
0	0,5	0,499994444382680	0,00000555561732
1	1,5	1,49997222166689	0,00002777833311
2	2,5	2,49992777561683	0,00007222438317
3	3,5	3,49986110549310	0,0001388945069
4	4,5	4,49977221055375	0,0002277894463
5	5,5	5,49966109005851	0,0003389099415
6	6,5	6,49952774326553	0,0004722567345
7	7,5	7,49937216943359	0,0006278305664
8	8,5	8,49919436782181	0,0008056321782
9	9,5	9,49899433768838	0,001005662312
10	10,5	10,4987720782919	0,001227921708

Tabela 1: Espectro de energia para os 10 primeiros níveis de energia do oscilador harmônico. Aqui consideramos  $\hbar = 1$  e  $\omega = 1$ . FONTE: próprios autores.

A partir da Tabela 1, observa-se que os valores do espectro obtido através do método de diferenças finitas são muito próximos dos valores teóricos. O maior desvio encontrado é da ordem de  $\delta E \cdot 10^{-3}$ . A precisão dos resultados é maior para os níveis de energia mais baixos, já que, conforme a energia aumenta, as autofunções ficam cada vez menos localizadas, ou seja, elas ainda são não nulas nas proximidades dos pontos de "infinito" numérico, ou seja, dos pontos extremos do intervalo de trabalho. Nestes pontos, o potencial já não é mais um oscilador harmônico e sim uma barreira infinita, o que é uma das limitações do algoritmo computacional, já mencionadas anteriormente. Isso de forma alguma invalida o método, na medida em que possamos estender o intervalo de integração e refinar a discretização, até o limite da capacidade computacional. Vale enfatizar que a

precisão ótima dos resultados resulta da mediania de fatores como a amplitude do intervalo de integração e o refinamento da malha, bem como de capacidade de memória capaz de lhes dar suporte (MONERAT *et al.*,2010).

Os autoestados associados aos cinco autovalores mais baixos da energia apresentadas na Tabela 1 são mostrados nas Figuras de 2 a 6.

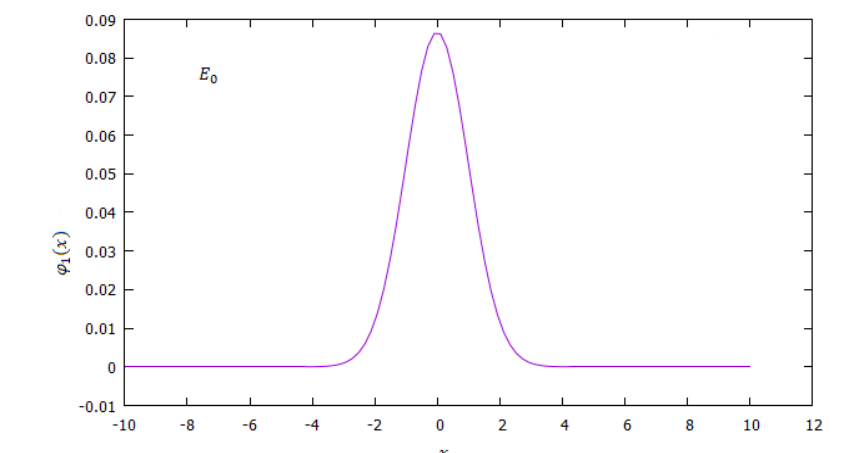


Figura 2: Primeiro autoestado do oscilador harmônico simples, associado ao autovalor de energia  $E_0$ . FONTE: Próprios autores.

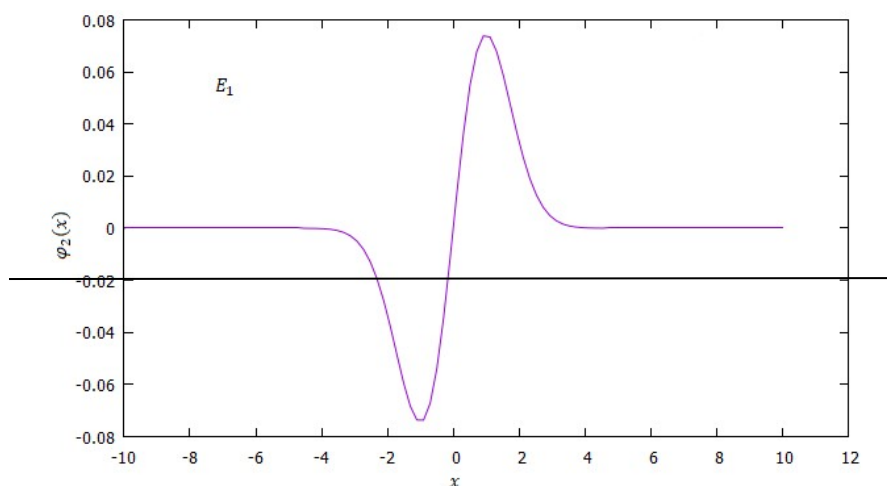


Figura 3: Segundo autoestado do oscilador harmônico simples, associado ao autovalor de energia  $E_1$ . FONTE: Próprios autores.

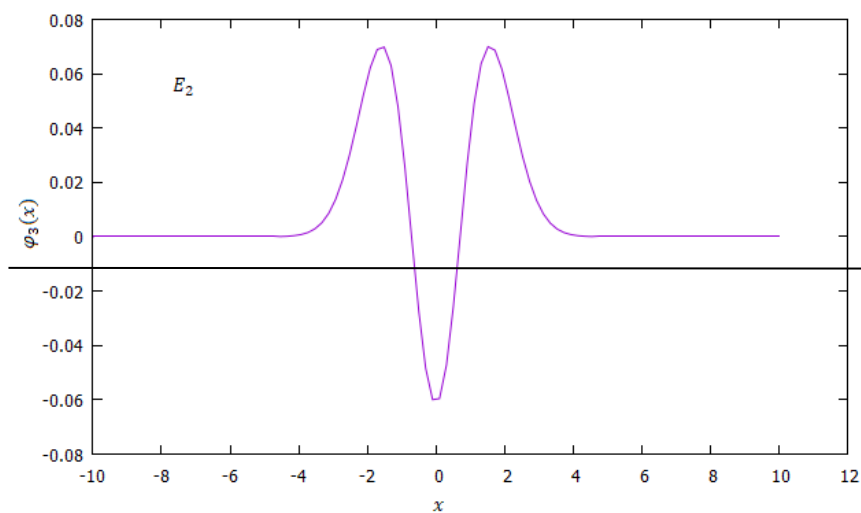


Figura 4: Terceiro autoestado do oscilador harmônico simples, associado ao autovalor de energia  $E_2$ .

FONTE: Próprios autores.

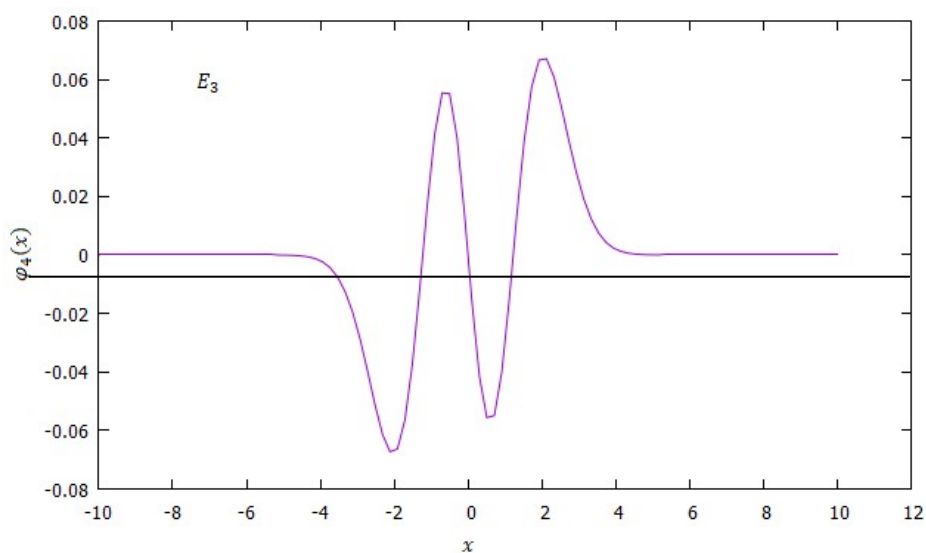


Figura 5: Quarto autoestado do oscilador harmônico simples, associado ao autovalor de energia  $E_3$ .

FONTE: Próprios autores.

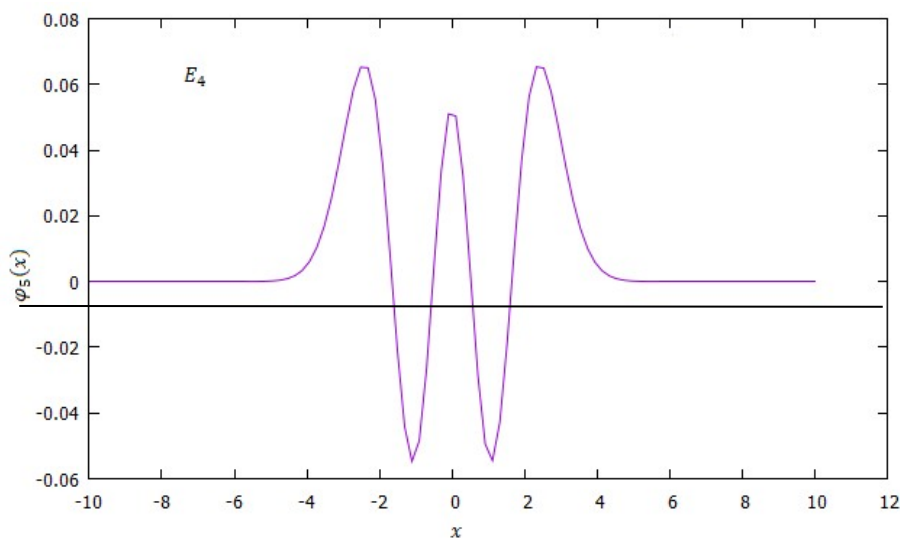


Figura 6: Quinto autoestado do oscilador harmônico simples, associado ao autovalor de energia  $E_4$ .

FONTE: próprios autores.

Observa-se que a autofunção do autoestado associado a energia  $E_0$  do oscilador harmônico não possui zeros, ou seja, não corta o eixo das abcissas. A do  $E_1$  possui apenas um zero,  $E_2$  dois zeros,  $E_3$  três zeros e  $E_4$  quatro zeros.

Agora que a eficácia do método foi verificada, vamos considerar um sistema mais complicado, que não possui solução analítica conhecida.

## 4. 2 O potencial não linear

Agora aplica-se o método de diferenças finitas a uma partícula submetida a um poço de potencial não linear da forma,

$$V(x) = \frac{V_0}{\text{sen}^2\left(\frac{\pi}{l}x\right)}, \quad (22)$$

em um intervalo  $0 \leq x \leq l$ . O potencial  $V(x)$  possui o seu comportamento tendendo ao infinito ( $V(x) \rightarrow \infty$ ) na medida que  $x \rightarrow 0$  e  $x \rightarrow l$ , tendo ao centro do intervalo  $V\left(\frac{l}{2}\right) = V_0$ . Os parâmetros  $leV_0$  referem-se a largura do poço e altura mínima do potencial superior ao nível zero da energia, respectivamente. A Figura 7 apresenta o gráfico deste potencial (SMIRNOV e FARIAS-JUNIOR, 2015).

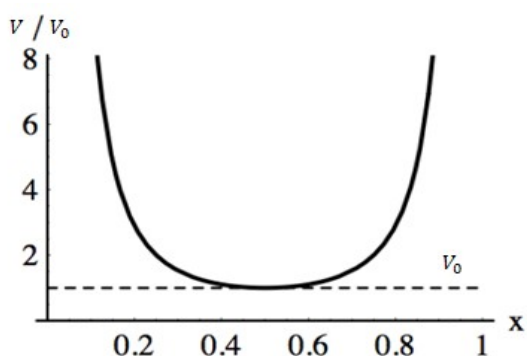


Figura 7: Potencial não linear  $V(x) = \frac{V_0}{\sin^2\left(\frac{\pi}{l}x\right)}$ . Fonte: SMIRNOV e FARIAS JUNIOR, 2015.

Fazendo uso da equação (20) foi possível encontrar o espectro de energia do sistema. Neste caso a malha construída utiliza 1500 pontos, no intervalo fechado  $[0,10]$ , com um  $h=0,013$ . E a largura do poço foi  $l=10$ . Sendo  $V_0=1$ . A Tabela 2 exibe os 10 primeiros níveis de energia para esse sistema.

$\alpha$	$E_\alpha$
0	1,24818385630436
1	1,79389827336423
2	2,43830515272261
3	3,18140238471801
4	4,02318742677188
5	4,96365730338950
6	6,00280860616980
7	7,14063749382615
8	8,37713969218747

9 9,71231049421432

Tabela 2: Os 10 primeiros níveis de energia para o poço de potencial não linear de largura  $l = 10$ .  
 FONTE: próprios autores.

Os cinco primeiros autoestados para esse sistema são mostrados nas Figuras de 8 a 12.

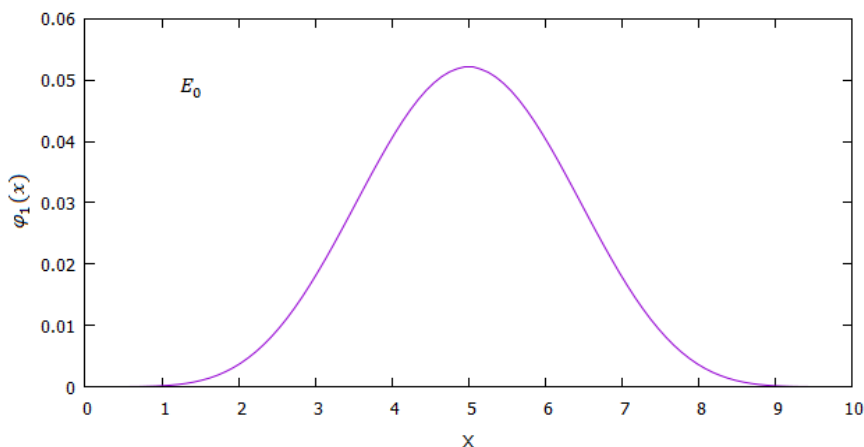


Figura 8: Primeiro autoestado de uma partícula submetida a um potencial não linear  $V(x) = \frac{1}{\text{sen}^2\left(\frac{\pi}{l}x\right)}$ , associado ao autovalor de energia  $E_0$ . FONTE: próprios autores.

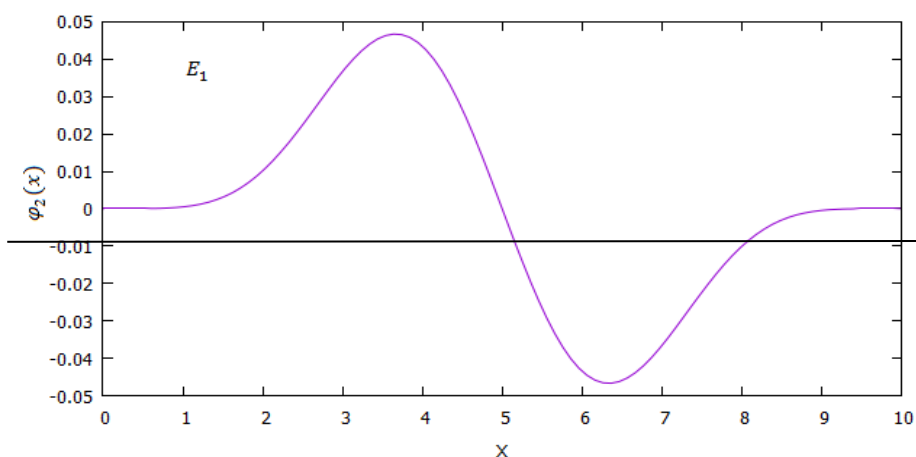


Figura 9: Segundo autoestado de uma partícula submetida a um potencial não linear

$V(x) = \frac{1}{\text{sen}^2\left(\frac{\pi}{l}x\right)}$ , associado ao autovalor de energia  $E_1$ . FONTE: próprios autores.

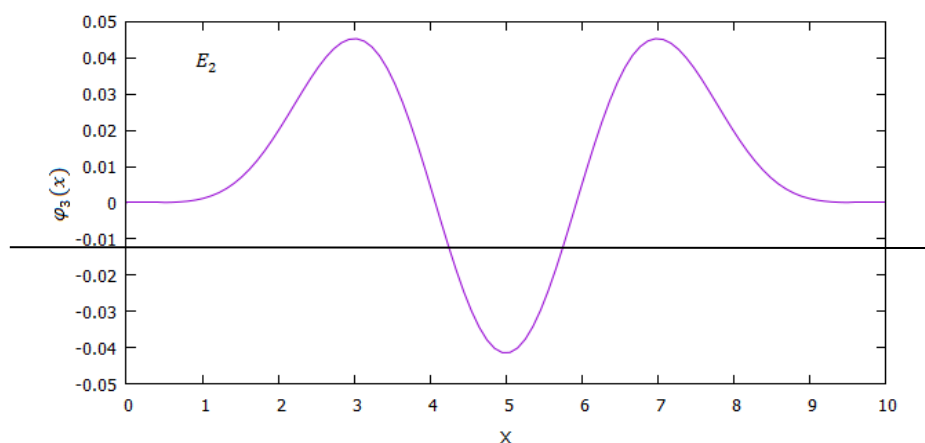


Figura 10: Terceiro autoestado de uma partícula submetida a um potencial não linear

$$V(x) = \frac{1}{\text{sen}^2\left(\frac{\pi}{l}x\right)}, \text{ associado ao autovalor de energia } E_2. \text{ FONTE: próprios autores}$$

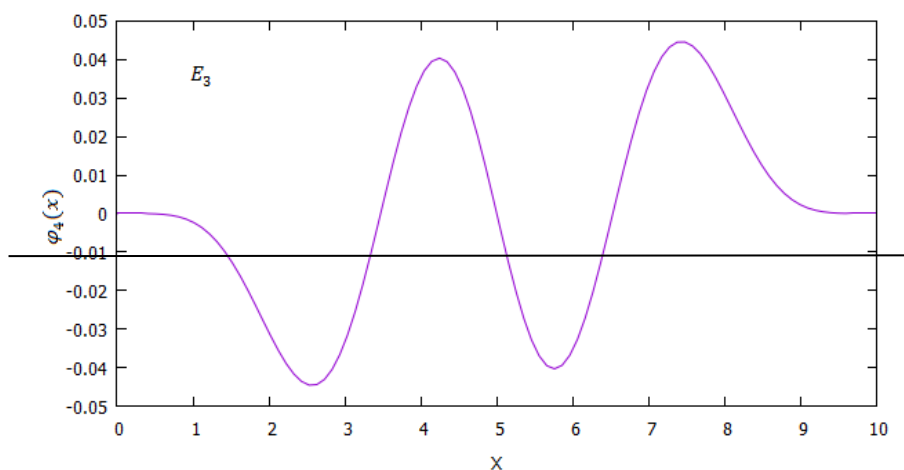


Figura 11: Quarto autoestado de uma partícula submetida a um potencial não linear  $V(x) = \frac{1}{\text{sen}^2\left(\frac{\pi}{l}x\right)}$ , associado ao autovalor de energia  $E_3$ . FONTE: próprios autores.

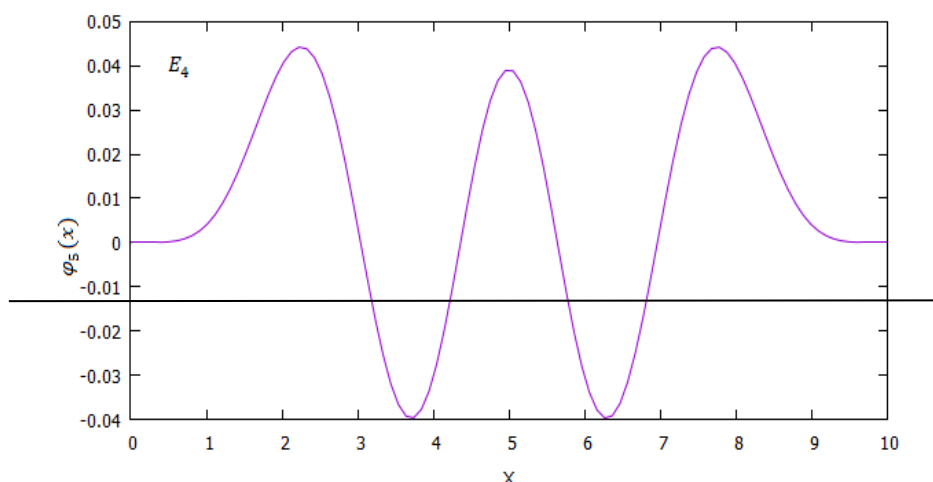


Figura 12: Quinto autoestado de uma partícula submetida a um potencial não linear  $V(x) = \frac{1}{\text{sen}^2\left(\frac{\pi}{l}x\right)}$ ,

associado ao autovalor de energia  $E_4$ . FONTE: próprios autores.

Observa-se que assim como, no caso do oscilador harmônico simples, a autofunção do autoestado associada a energia  $E_0$  do potencial não linear, não possui zeros, ou seja, não corta o eixo das abscissas. A do  $E_1$  possui apenas um zero, a do  $E_2$  dois zeros, a do  $E_3$  três zeros e a do  $E_4$  quatro zeros.

As Tabelas de 3 a 5 mostram os resultados para os 10 níveis de energia do potencial não linear com os seguintes valores para a largura do poço:  $l = 20$ ,  $l = 30$  e  $l = 40$ . Os resultados mostram que para essas larguras do poço, esse sistema não constitui um sistema físico. Pois de acordo com a mecânica quântica uma partícula em um sistema físico não pode ter energia do estado fundamental nula, pois assim ela teria contrariado o princípio da incerteza de Heisenberg (RAYMOND, 2010).

A largura do poço correspondente ao valor  $l=17$  indica a transição para o potencial não linear. Ou seja, para larguras do poço maiores que 17, o sistema não é físico.

$\alpha$	$E_\alpha$
0	0,0000000000000000E+000
1	0,0000000000000000E+000

2	4,352346609786269E-008
3	-4,352346609786269E-008
4	-7,452613703859823E-005
5	7,452613703859824E-005
6	1,76665673479081
7	2,000000000000000
8	2,22899852512984
9	2,46389856188899

Tabela 3 - Os 10 primeiros níveis de energia para o poço de potencial não linear de largura  $l = 20$ .

FONTE: próprios autores.

$\alpha$	$E_\alpha$
0	0,000000000000000E+000
1	0,525468276056286
2	-0,525468276056288
3	-7,31985298810023
4	7,31985298810027
5	12,7089106641562
6	-12,7089106641562
7	-16,9802595471425
8	20,5820310294284
9	-20,5820310294284

Tabela 4 - Os 10 primeiros níveis de energia para o poço de potencial não linear de largura  $l = 30$ .

FONTE: próprios autores.

$\alpha$	$E_\alpha$
0	0,000000000000000E+000
1	-1,84524874987722
2	1,84524874987722
3	-3,52535175198675
4	3,52535175198676
5	5,77620344832593
6	-5,77620344832595
7	8,93908582344543

8 -8,93908582344545

9 -12,0955616803633

Tabela 5- Os 10 primeiros níveis de energia para o poço de potencial não linear de largura  $l = 40$ .

FONTE: próprios autores.

## 5. Considerações Finais

Nota-se que o método de diferenças finitas, devido à sua simplicidade e ampla aplicabilidade, é uma ferramenta importante na obtenção da solução da equação de Schrödinger de sistemas físicos cujas soluções analíticas não sejam conhecidas. Enfatizamos, também a precisão do método, que o torna uma ferramenta matemática importante não somente para os alunos de graduação em engenharia, mas também para alunos de pós-graduação.

Neste trabalho, o método de diferenças finitas foi apresentado em detalhes e em seguida aplicado a dois sistemas físicos: o oscilador harmônico simples, cuja solução analítica é conhecida na literatura e uma partícula submetida a um potencial não linear. Para ambos sistemas mencionados, o método aplicado forneceu respectivamente o seu espectro de energia e os seus autoestados.

O oscilador harmônico simples já foi estudado, anteriormente, utilizando o método de diferenças finitas (MONERAT *et al.*, 2010). Entretanto, ele foi reproduzido novamente neste trabalho para testar a eficiência e veracidade do método. Mostrando através dos nossos resultados que o espectro de energia obtido numericamente pelo método concorda com o resultado analítico com uma precisão boa.

No caso de uma partícula submetida a um potencial não linear do tipo,

$V(x) = \frac{1}{\sin^2\left(\frac{\pi}{l}x\right)}$ , os resultados obtidos pelo método de diferenças finitas para os 5

primeiros autoestados do sistema, para  $l=10$ , são apresentados nas Figuras de 8 a 12. E os seus 10 primeiros níveis de energia são apresentados na Tabela 2.

Nossos resultados mostram que a largura do poço correspondente ao valor  $l=17$  indica uma transição para o potencial não linear. Ou seja, para larguras do poço maiores que 17, o sistema não é físico. Pois de acordo com a mecânica quântica uma partícula em um sistema físico não pode ter energia do estado fundamental nula, pois assim ela teria contrariado o princípio da incerteza de Heisenberg (RAYMOND, 2010). Isto pode ser constatado nas Tabelas de 3 a 5 para os 10 níveis de energia do potencial não linear com os seguintes valores para a largura do poço:  $l = 20$ ,  $l = 30$  e  $l = 40$ .

É importante salientar, que estes resultados são novos. Portanto, outros trabalhos estudando este assunto serão importantes para comprovar se estes resultados, estão corretos ou não.

Sem falar, que o objetivo deste trabalho foi apresentar aos alunos envolvidos no projeto, um método numérico muito eficiente e prático na resolução de equações diferenciais. E apresentar a eles também, um assunto de suma importância em Física Moderna, que é a equação de Schrödinger.

## Referências

CHAPRA, S. C.; CANALE, R. P. Numerical Methods for Engineers. New York: McGraw-Hill, 1988.

EISBERG, R.; RESNICK, R. Física Quântica. Rio de Janeiro: Elsevier, 1979.

GREINER, W., *Quantum Mechanics – An Introduction*. New York: Springer, 2001.

GRIFFITHS, D. J. *Introduction Quantum Mechanics*. Prentice Hall, 1995.

MONERAT, G.A.; FERREIRA FILHO, L.G.; SILVA E.V.C.; OLIVEIRA NETO G.; NOGUEIRA P.H.A.S.; ASSUMPÇÃO A.R.P. Quantização de sistemas hamiltonianos via método de diferenças finitas. Revista Brasileira de Ensino de Física. Rio de Janeiro, 2010.

RAYMOND, C. Físico-Química: Para as Ciências Químicas e Biológicas. 3 ed. McGraw Hill Brasil, 2010.

SCHMIDT, D. G. Erwin Schrödinger: a compreensão do mundo infinitesimal através de uma realidade ondulatória. São Paulo. 2008. Disponível em < <https://tede2.pucsp.br/bitstream/handle/13394/1/Douglas%20Guilherme%20Schmidt.pdf>> Acesso em 30 ago. 2019.

SCHRÖDINGER E. Proc. Roy. Iricsh Acad. A 46, 9, 1940.

SMIRNOV, A.; FARIAS-JUNIOR, A. J. D. Partícula em um poço infinito suave. Sergipe. 2015.

Processo de Avaliação por Pares: (*Blind Review* - Análise do Texto Anônimo)

Publicado na Revista Vozes dos Vales - [www.ufvjm.edu.br/vozes](http://www.ufvjm.edu.br/vozes) em: 05/2020

Revista Científica Vozes dos Vales - UFVJM - Minas Gerais - Brasil

[www.ufvjm.edu.br/vozes](http://www.ufvjm.edu.br/vozes)

[www.facebook.com/revistavozesdosvales](https://www.facebook.com/revistavozesdosvales)

UFVJM: 120.2.095-2011 - QUALIS/CAPES - LATINDEX: 22524 - ISSN: 2238-6424