

SOLUÇÕES NUMÉRICAS DA EQUAÇÃO DE SCHRODINGER: UMA ABORDAGEM COM DIFERENÇAS FINITAS PARA POTENCIAIS CANÔNICOS

João Vitor da Silva Souza ¹
Ericleiton Rodrigues de Macedo ²

RESUMO

A mecânica quântica é a área da Física que estuda o comportamento e as propriedades de partículas subatômicas que compõem a matéria. Por isso, o movimento de partículas como o elétron não pode ser descrito com base nos princípios da mecânica clássica. Entre as diversas aplicações da mecânica quântica, destaca-se a modelagem de sistemas moleculares, nos quais as interações entre átomos exigem uma descrição em termos de potenciais que refletem sua natureza quântica. Nesse contexto, o potencial de Lennard-Jones se apresenta como uma ferramenta importante, por estar associado ao comportamento de moléculas e ser amplamente utilizado em simulações de dinâmica molecular (DM). Ele descreve a interação entre átomos e moléculas, permitindo, por exemplo, a modelagem das forças intermoleculares entre átomos de argônio no estado líquido. Este projeto teve como objetivo inicial aplicar o método de diferenças finitas (MDF) à equação de Schrödinger com o potencial de Lennard-Jones, em conjunto com o formalismo da mecânica quântica supersimétrica, e comparar os resultados com os obtidos via cálculo variacional. O MDF é uma abordagem numérica que permite discretizar o espaço e o tempo, convertendo equações diferenciais em sistemas de equações algébricas resolvíveis computacionalmente. Contudo, a aplicação ao potencial de Lennard-Jones revelou-se instável numericamente. Essa limitação levou a um redirecionamento do estudo para potenciais canônicos e de solução analítica conhecida, como o potencial degrau e o fenômeno de tunelamento quântico. O modelo resultante demonstrou eficácia didática e estabeleceu uma base sólida para futuras investigações em simulações numéricas na mecânica quântica.

Palavras-chave: Métodos de Diferenças Finitas; Equação de Schrodinger; Potenciais Canônicos.

¹ Graduando em Licenciatura em Física do Instituto Federal do Sertão Pernambucano - IFsertãoPE, autorprincipal@email.com;

² Docente do Curso de Licenciatura em Física do Instituto Federal do Sertão Pernambucano - IFsertãoPE, coautor1@email.com;

INTRODUÇÃO

De maneira geral, a mecânica quântica é a área da Física que estuda o comportamento e as propriedades de partículas subatômicas que compõem a matéria. Com isso, o movimento de partículas como o elétron não podem ser descritos em termos da mecânica clássica (ZEILMANN, 2024). Sendo assim, segundo Lobato (2024), entre 1926 e 1927, a partir do comportamento ondulatório de uma partícula e a conservação de energia, Erwin Schrödinger desenvolveu uma equação que descreve as ações dessa partícula, a equação de Schrödinger.

A característica principal da equação de Schrödinger é o potencial utilizado. Isso significa que, em certos casos, a solução da equação não é trivial e só pode ser encontrada através de métodos numéricos, dependendo da natureza desse potencial. Um método numérico bastante utilizado para solucionar esse tipo de problema é o Método de Diferenças Finitas (MDF). O MDF é uma abordagem numérica que permite discretizar o espaço e o tempo, transformando a equação diferencial em um conjunto de equações algébricas que podem ser resolvidas computacionalmente (MONERAT, 2010).

Inicialmente, o intuito deste trabalho foi utilizar o método de diferenças finitas (MDF) para solucionar a equação para o potencial de Lennard-Jones, já que o método aplicado a este potencial aparentava não ser tão abordado na literatura. O potencial de Lennard-Jones está associado ao comportamento de moléculas (OLIVEIRA, 2019). Ou seja, é bastante utilizado em Dinâmica Molecular (DM), pois descreve a interação dos átomos e moléculas, com isso, o potencial de Lennard-Jones pode ser aplicado para o cálculo de interações intermoleculares, por exemplo, de átomos de argônio no estado líquido (COLUCI, s.d.).

Em virtude das instabilidades na solução para o potencial de Lennard-Jones, a pesquisa foi redirecionada para a análise de potenciais canônicos, cujas soluções são analíticas e bem estabelecidas, como os casos do potencial degrau e do tunelamento quântico.

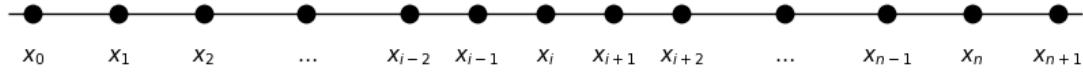


REFERENCIAL TEÓRICO

Método de Diferenças Finitas (MDF)

O método de diferenças finitas (MDF) é utilizado para transformar equações diferenciais ordinárias ou parciais, linear ou não linear, em um sistema de equações algébricas (PEREIRA apud RUGGIERO; LOPES, 2020). Assim, as incógnitas das equações são os valores da função em cada ponto de um conjunto discreto, que estão igualmente espaçados (MONERAT, 2010). Ou seja, a solução de uma equação diferencial para um conjunto de valores (domínio) nos leva ao conhecimento dos valores das variáveis estudadas, por isso o método consiste em resolver as equações em pontos discretos (DA SILVA, 2011).

Figura 1: Representação da discretização da variável de integração.



Fonte: O próprio autor.

De acordo com Monerat (2010), pode-se obter as fórmulas de aproximação através da série de Taylor:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{1}{2}f''(x_i)h^2 + \frac{1}{3}f'''(x_i)h^3 + O(h^4) \quad (1)$$

em que h é o espaçamento. Podemos considerar até o termo de primeira ordem e isolando, tem-se:

$$f'_A(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} \quad (2)$$

que é a diferenciação ascendente. De maneira similar, pode-se escrever a diferenciação descendente

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - f'(x_i)h + \frac{1}{2}f''(x_i)h^2 + \frac{1}{3}f'''(x_i)h^3 + O(h^4) \quad (3)$$

o que leva a

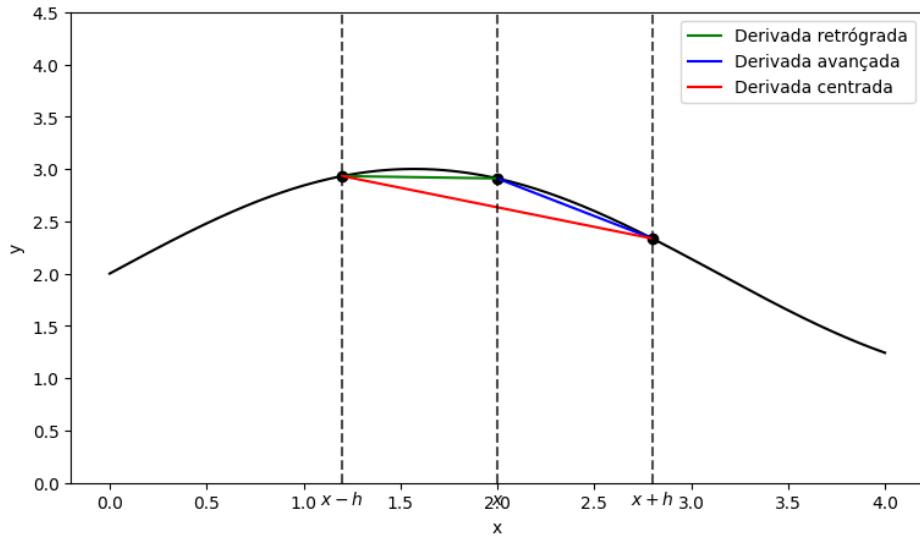
$$f'_D(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} \quad (4)$$

e, por fim, escrever a centrada subtraindo as duas séries de Taylor, 1 por 3, chega-se a

$$f'_C(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} \quad (5)$$

veja que foi possível definir a discretização para a diferenciação de primeira ordem. Na figura 2 é possível observar a representação geométrica das derivadas obtidas a partir do método de diferenças finitas.

Figura 2: Representação geométrica da derivada. Em verde temos a derivada descendente (retrógrada), em vermelho a centrada e, em azul, a ascendente (avançada).



Fonte: O próprio autor.

Método de diferenças finitas e equação de Schrodinger: sistema de equações algébricas

Na mecânica quântica, para descrever as características de uma partícula, teremos que determinar a função de onda $\Psi(x, t)$. Assim, segundo Griffiths (2011), para obter a função de onda é necessário resolver a equação de Schrodinger 1D, que é dada por:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi \quad (6)$$

Em que pode-se escrever a parte independente do tempo da seguinte forma,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi = E\psi \quad (7)$$

note que para determinar $\psi(x)$ iremos precisar do potencial V . A partir do cálculo variacional, a eq.(7) é escrita como,

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \quad (8)$$

A equação de Schrodinger independente do tempo tem uma derivada de segunda ordem, então, pode-se fazer o processo de diferenciação de segunda ordem

$$f''_C = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2} \quad (9)$$

Pode-se escrever a eq.(7), como

$$-\frac{1}{2m} \left[\frac{\psi(x_{i+1}) - 2\psi(x_i) + \psi(x_{i-1})}{h^2} \right] + V(x_i)\psi(x_i) = E\psi(x_i) \quad (10)$$

fazendo $\hbar = 1$.

Segundo Pereira (2020), a equação de Schrodinger independente do tempo é um problema de valor de contorno (PVC), é fácil observar isso devido a dependência apenas na posição.

Adotando $\psi(x_0) = \psi(x_{n+1}) = 0$, tem-se

$$\psi(X) = \begin{pmatrix} \psi(x_1) \\ \psi(x_2) \\ \vdots \\ \psi(x_n) \end{pmatrix} \quad (11)$$

o que nos leva a escrever

$$F(x) = \frac{1}{mh^2} + V(x) \quad (12)$$

em que

$$F(x) = \frac{1}{mh^2} + V(x) \quad (13)$$

De acordo com Monerat (2010), a matriz. $n \times n$ é real e simétrica, ou seja, diagonalizável. Assim, podemos garantir a existência de uma base de autoestados.

METODOLOGIA

Para o desenvolvimento deste trabalho, foram seguidas as seguintes etapas:

1. Realização de uma revisão bibliográfica aprofundada.
2. Criação de um modelo computacional para a equação de Schrödinger, capaz de resolver diversos potenciais canônicos.
3. Comparação dos resultados computacionais com os dados e soluções já estabelecidos na literatura.

Para construção do modelo computacional, foi utilizado a linguagem de programação em Python, onde foram utilizadas as bibliotecas: *Numpy*, *Scipy.linalg* e *Matplotlib* (MIRANDA, 2018). O código seguiu um padrão, definindo inicialmente as constantes, depois o potencial e a construção da matriz Hamiltoniana. Como por exemplo, o código utilizado para o potencial degrau:

```

>>> from scipy.linalg import eigh
>>> import numpy as np
>>> import matplotlib.pyplot as plt
# Constantes
>>> hbar = 1
>>> m = 1
>>> x0 = -25
>>> xNm1 = 25
>>> N = 1001 # mais pontos melhora precisão
# Passo espacial
>>> h = (xNm1 - x0) / (N - 1)
>>> x = np.linspace(x0, xNm1, N)
# Potencial degrau: V=0 se x<0, V=0.5 se x>=0
>>> V = np.array([0 if xi < 0 else 0.5 for xi in x])
# Hamiltoniano
H = np.zeros((N, N))
for i in range(N):
    H[i, i] = V[i] + hbar**2/(m*h**2) # diagonal
    if i > 0:
        H[i, i-1] = -hbar**2/(2*m*h**2)
    if i < N-1:
        H[i, i+1] = -hbar**2/(2*m*h**2)
# Resolver autovalores

```





```
>>> energias, autovetores = eigh(H)
```

```
# Pegar o estado fundamental
>>> psi = autovetores[:, 0]
# Normalizar
>>> psi = psi / np.sqrt(np.sum(np.abs(psi)**2) * h)
>>> print("Energias (primeiros 5):")
for n in range(5):
    print(f"n={n}: {energias[n]:.4f}")
# Plot
>>> plt.plot(x, psi, label=r"\psi(x)")
>>> plt.plot(x, V, label="V(x)", color="red")
>>> plt.xlabel("x")
>>> plt.ylabel("\psi(x), V(x)")
>>> plt.title("Função de Onda - Potrau")
>>> plt.legend()
>>> plt.grid(True)
>>> plt.savefig("potencial_degrau.png", dpi=500)
>>> plt.show()
```

Para os outros potenciais canônicos foi utilizado o mesmo padrão de código, modificando apenas o potencial. Na tabela 1, estão descritos os potenciais solucionados juntamente com uma breve descrição de cada um. Os códigos completos podem ser acessados em: [Simulação dos resultados - MDF .pdf](#)

Tabela 1: Descrição breve de cada potencial simulado com método de diferenças finitas.

Potencial	Descrição
Poço quadrado Infinito	Um potencial que é zero dentro de uma região finita e infinito fora dela. As partículas ficam confinadas no poço.
Potencial Degrau	É um potencial que muda abruptamente de valor em algum ponto do espaço. Utilizado para estudar reflexão e transmissão de partículas em mecânica quântica.
Oscilador Harmônico	Potencial do tipo $V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$, cresce quadraticamente com a distância do centro.

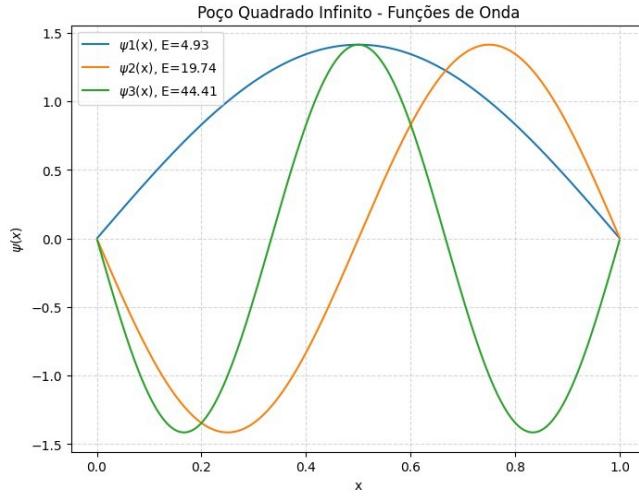
Fonte: O próprio autor.



RESULTADOS E DISCUSSÃO

O primeiro potencial canônico simulado foi o poço quadrado infinito, geralmente o ponto de partida no estudo da mecânica quântica. Esse potencial é definido por uma função $V(x)$ nula dentro de uma região de largura L . No caso considerado, adotou-se $L = 1$. A partir disso, foi possível simular o estado fundamental, bem como o primeiro e o segundo estados excitados, como ilustrado na Figura 3.

Figura 3: Simulação do estado fundamental (azul), primeiro estado excitado (amarelo) e segundo estado excitado (verde) do poço quadrado infinito.



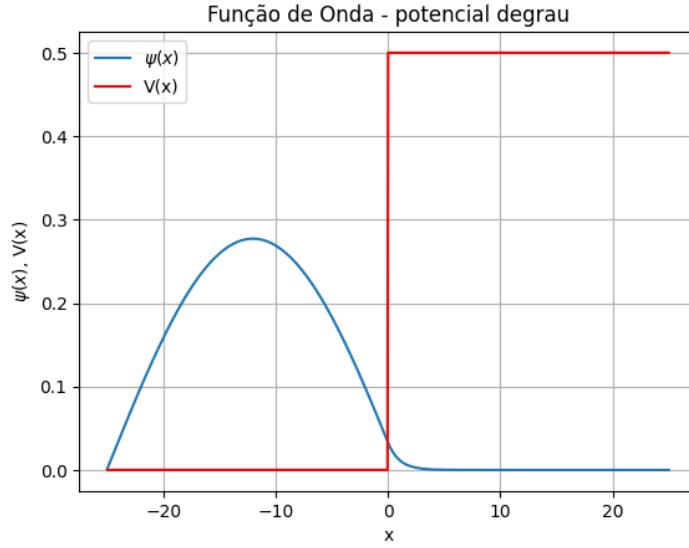
Fonte: O próprio autor.

Já para o potencial degrau, defini-se $V(x) = 0$ para $x < 0$ e $V(x) = 0,5$ para $x > 0$, observe a figura 4. Assim, nota-se que a função de onda apresenta um comportamento oscilatório na região $x < 0$, onde o potencial é nulo, e passa a decair exponencialmente para $x > 0$, região em que o potencial se torna constante e maior que a energia da partícula.

No contexto do potencial degrau, pode-se ainda considerar uma terceira região, em que o potencial retorna a ser nulo. Nesse cenário, torna-se evidente o fenômeno do tunelamento quântico, caracterizado pela possibilidade de a função de onda atravessar a barreira e se propagar novamente após ela.



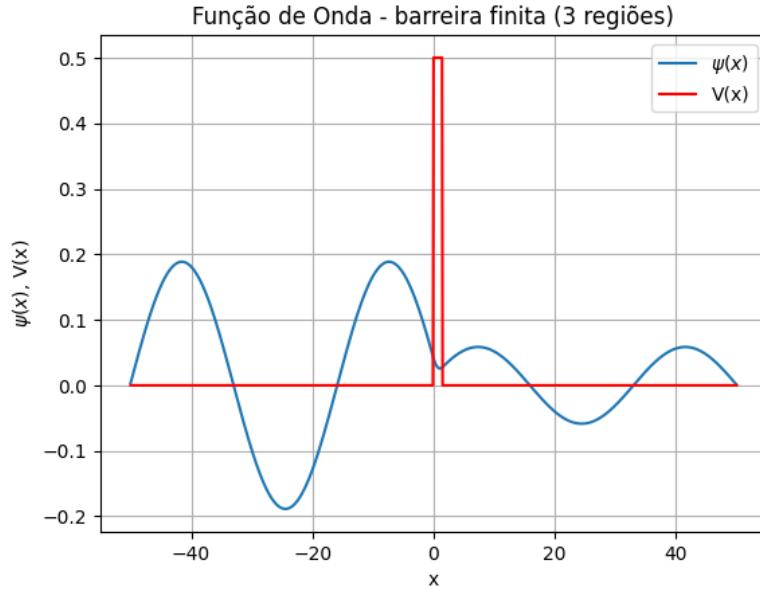
Figura 4: Simulação do potencial degrau. Para $n = 0$.
IX Seminário Nacional do PIBID



Fonte: O próprio autor.

Dessa forma, nesta simulação mantém-se as condições do potencial mostradas na Figura 4, sendo adicionada uma terceira região, conforme ilustrado na Figura 5. Ou seja, para $0 \leq x < 1,5$ o potencial é $V(x) = 0,5$, após essa barreira, $V(x)$ anula-se novamente.

Figura 5: Simulação do tunelamento quântico com adaptação no potencial degrau, tornando uma barreira de potencial. Para $n = 4$.

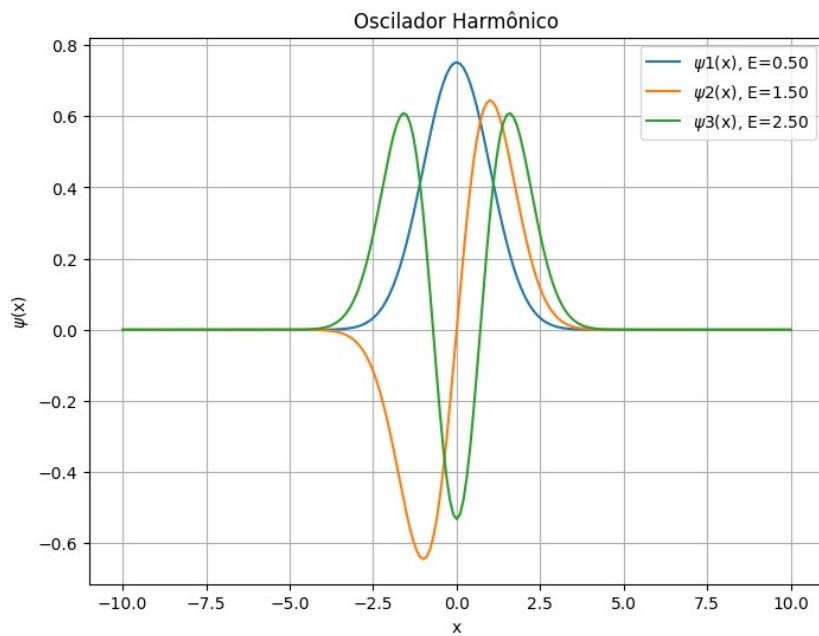


Fonte: O próprio autor.



Por fim, foi realizada a simulação do potencial do oscilador harmônico quântico, descrito na Tabela 1. Na Figura 6, observa-se o comportamento característico das funções de onda, evidenciando os três primeiros estados quânticos. Nota-se que as autofunções apresentam a forma esperada, com simetria alternada e oscilações crescentes à medida que aumenta o número quântico.

Figura 6: Simulação do potencial do oscilador harmônico quântico.



Fonte: O próprio autor.

Para aprofundar a análise do oscilador harmônico quântico, foram determinadas as energias tanto pela solução analítica quanto pelo método de diferenças finitas, a fim de avaliar a precisão deste último. Os resultados comparativos estão apresentados na Tabela 2.

Tabela 2: Energias do oscilador harmônico analítico e numérica.

Estado	Energia analítica	Energia MDF
n=0	0.50	0.4997
n=1	1.50	1.4984
n=2	2.50	2.4959

Fonte: O próprio autor.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

As simulações validaram a eficácia do método das diferenças finitas, gerando resultados que convergem de forma satisfatória com os potenciais canônicos esperados, confirmando sua adequação para análises preliminares. Para ampliar o rigor e a precisão, futuras investigações devem focar na implementação de métodos numéricos de ordem superior, como os algoritmos de Monte Carlo ou Runge-Kutta. Uma perspectiva imediata e de relevância é a aplicação desses métodos para a solução precisa do potencial de Lennard-Jones, visando a modelagem detalhada de sistemas interatômicos.

REFERÊNCIAS

- ARAUJO, João Cesar Boreggio de; BORGES, Gláucia RP; DRIGO FILHO, Elso. Supersimetria, método variacional e potencial de Lennard-Jones (12, 6). Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 28, p. 41-44, 2006.
- BATAEL, Hugo de Oliveira et al. Operadores-escada generalizados para sistemas quânticos. Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 40, n. 2, p. e2305, 2018.
- CHIQUITO, Adenilson J.; DE ALMEIDA, Norton G. O Potencial de Lennard-Jones: Aplicação a Moléculas Diatômicas. Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 21, n. 2, 1999.
- COLUCI, Vitor Rafael; VAZ, Cidade Universitária Zeferino. SIMULAÇÃO DE DINÂMICA MOLECULAR USANDO O POTENCIAL DE LENNARD-JONES,[s.d.]. Disponível em: https://www.academia.edu/download/54444024/4_-_EMC_2009_-_Simulacao_de_Dinamica_Molecular_Usando_o_Potencial_de_Lennard-Jones.pdf
- DA SILVA, Selênio Feio; SOARES, Alexandre Andrade Brandão. O Método das Diferenças Finitas aplicado à teoria das vigas. Revista Traços, v. 13, n. 27, 2011.
- DIAS, Neylan Leal et al. Uma introdução ao método das diferenças finitas: condução de calor, 2021.
- GRIFFITHS, David J., Mecânica Quântica. Edição 2^a Ed. Pearson Education (2011).



LOBATO, Fran Sérgio; LIMA, William Júnio; LIBOTTE, Gustavo Barbosa. Resolução Numérica da Equação de Schrödinger usando o Método da Colocação Ortogonal. Revista Interdisciplinar de Pesquisa em Engenharia, [S. l.], v. 8, n. 2, p. 62–70, 2023. Disponível em: <https://periodicos.unb.br/index.php/ripe/article/view/46839>. Acesso em: 31 maio. 2024.

MIRANDA, Dayana da Silva. Solução da equação de Schrödinger por diferenças finitas e pelo método variacional. 2018. Trabalho de Conclusão de Curso (Licenciatura em Física) — Universidade Federal do Sul e Sudeste do Pará, Instituto de Ciências Exatas, Faculdade de Física, Marabá, 2018.

MONERAT, G. A. et al. Quantização de sistemas hamiltonianos via método de diferenças finitas. Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 32, p. 1304-1310, 2010.

OLIVEIRA, Rhuiago Mendes de. Combinação de cálculos de estrutura eletrônica e espectroscopia rovibracional para o aprimoramento do Potencial Lennard-Jones na descrição de Complexos de van der Waals envolvendo gases nobres. 2019.

PEREIRA, Lucas Carvalho; FERREIRA, João Vítor Batista; DO NASCIMENTO, Valter Aragão. Soluções variacionais e numéricas da Equação de Schrödinger 1D submetida ao potencial de Pöschl-Teller. Revista Principia-Divulgação Científica e Tecnológica do IFPB, n. 48, p. 156-168, 2020. 19

VASCONCELLOS, Luis Antonio da S.; DE SOUZA, Gustavo VB; BRUNO-ALFONSO, Alexys. Aceleração da convergência do Método das Diferenças Finitas na resolução da equação de Schrödinger unidimensional. a a, v. 2, n. 2, p. 0.

RIBEIRO, Gerson José Pereira. Solução da equação de Schrödinger dependente do tempo pelo método FDTD. 2016.

ZEILMANN, Adriano Pilla; SPENASSATO, Débora; ORO, Neuza. Equação de Schrödinger: resolução analítica e simulação para o átomo de hidrogênio. VETOR - Revista de Ciências Exatas e Engenharias, [S. l.], v. 18, n. 2, p. 34–44, 2010. Disponível em: <https://periodicos.furg.br/vetor/article/view/1695>. Acesso em: 31 maio. 2024.

$$\begin{pmatrix} F(x_1) & -1/2mh^2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1/2mh^2 & F(x_2) & -1/2mh^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1/2mh^2 & F(x_3) & -1/2mh^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -1/2mh^2 & F(x_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(x_1) \\ \psi(x_2) \\ \vdots \\ \psi(x_n) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi(x_1) \\ \psi(x_2) \\ \vdots \\ \psi(x_n) \end{pmatrix}$$