



UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
CURSO DE LICENCIATURA EM QUÍMICA

JOÃO GABRIEL SOARES MONTENEGRO

**MÉTODO DE RUNGE-KUTTA DE 4ª ORDEM PARA A EQUAÇÃO DE
SCHRÖDINGER ESTACIONÁRIA COM ENERGIA ZERO**

Recife
2021

JOÃO GABRIEL SOARES MONTENEGRO

**MÉTODO DE RUNGE-KUTTA DE 4ª ORDEM PARA A EQUAÇÃO DE
SCHRÖDINGER ESTACIONÁRIA COM ENERGIA ZERO**

Monografia apresentada à coordenação do curso de Licenciatura em Química da Universidade Federal Rural de Pernambuco, como parte dos requisitos para obtenção do título de Licenciado em Química.

Orientador: Prof. Dr. Cristiano Costa Bastos

Recife

2021

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal Rural de Pernambuco
Sistema Integrado de Bibliotecas
Gerada automaticamente, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

- M777m Montenegro, João Gabriel Soares
Método de Runge-Kutta de 4ª ordem para a equação de Schrödinger estacionária com energia zero / João Gabriel Soares Montenegro. - 2021.
56 f. : il.
- Orientador: Cristiano Costa Bastos.
Inclui referências e apêndice(s).
- Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) - Universidade Federal Rural de Pernambuco, Licenciatura em Química, Recife, 2022.
1. Runge-Kutta. 2. Confinamento quântico. 3. Curvas planas. 4. Modo zero. I. Bastos, Cristiano Costa, orient. II. Título

UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
CURSO DE LICENCIATURA EM QUÍMICA

JOÃO GABRIEL SOARES MONTENEGRO

**MÉTODO DE RUNGE-KUTTA DE 4ª ORDEM PARA A EQUAÇÃO DE
SCHRÖDINGER ESTACIONÁRIA COM ENERGIA ZERO**

Aprovado em: 23 de dezembro de 2021.

Banca Examinadora

Cristiano Costa Bastos

Orientador – Departamento de Química
UFRPE

Gleudson Gomes da Silva

1º avaliador – Departamento de Matemática
UFPE

Severino Carlos Bezerra de Oliveira

2º avaliador – Departamento de Química
UFRPE

Dedico este trabalho à minha avó materna, Cícera Martins, analfabeta até algum tempo atrás, que sempre achou bonito quem estuda.

AGRADECIMENTOS

“Se enxerguei mais longe, foi porque me apoiei sobre os ombros de gigantes.” A célebre frase de Isaac Newton talvez seja a máxima representação de gratidão às figuras importantes na trajetória acadêmica de qualquer estudante. Os gigantes que me cederam seus ombros até aqui, são muitos e certamente eu precisaria de mais 40 páginas para agradecer a todos, porém tenho que fazê-lo de maneira sucinta.

Inicialmente, agradeço aos meus familiares mais próximos: Andréa Montenegro, Mauro Montenegro, Eduarda Montenegro, Ely Soares e Cícera Martins, por todo o apoio emocional e financeiro durante esta trajetória.

Ao orientador do presente trabalho, Prof. Dr. Cristiano Bastos, por acreditar em minha capacidade, pelo respeito recíproco e por toda cultura, acadêmica ou não, que me apresentou.

Ao meu primeiro orientador no universo acadêmico, Prof. Dr. Severino Carlos, com quem aprendi a dar os primeiros passos de suma importância àquele que deseja dedicar a vida à ciência.

Aos grandes mestres que tive a honra de ser aprendiz, em especial ao Prof. Dr. Tiago Veras, por toda a matemática em nível superior e à Profa. Dra. Maria José, por toda orientação, amizade e troca, durante o período em que passei na monitoria e como estudante na disciplina ministrada pela mesma.

Aos grandes amigos que conheci durante o percurso, Milton Nascimento, Hsila Cavalcante e Arthur Oliveira, por tornarem a caminhada mais leve.

Aos amigos externos ao âmbito acadêmico, Osmar Lucas e Alejandro Estévan, por toda a esperança e forças depositadas, essenciais para a conclusão desta etapa em minha vida.

À Rayane Aciole, pela parceria amorosa que tive a sorte de encontrar nesta trajetória acadêmica e que me tem possibilitado viver momentos incríveis de reflexão, amor e aprendizado.

Por fim, agradeço a todos e todas que fazem a UFRPE ser um ambiente que proporciona crescimento pessoal e intelectual a tantas pessoas, como proporcionou a mim.

“There’s a natural mystic blowing through the air”
(Bob Marley)

RESUMO

A equação de Schrödinger vem sendo resolvida numericamente por diversos métodos de Runge-Kutta. O estudo desta equação considerando a energia do sistema sendo nula, entre diversas outras aplicações, permite a análise do estado limite de ligação de uma partícula em um dado sistema quântico. Assim, no presente trabalho resolvemos a equação em seu modo zero, considerando uma abordagem extrínseca do confinamento em uma região unidimensional, utilizando o método de Runge-Kutta de 4ª ordem mais utilizado para resoluções de EDOs. Inicialmente, obtivemos numericamente as funções de onda para uma partícula confinada em uma reta e em circunferências de diferentes raios, por serem curvas com parametrizações por comprimento de arco conhecidas. Em seguida estudamos curvas a partir de suas curvaturas, o que permitiu o estudo do confinamento em espirais de Arquimedes e em espirais logarítmicas. Por fim, estudamos o confinamento em curvas hipotéticas que ainda não possuem parametrizações definidas. Os resultados obtidos possibilitaram a análise das regiões nas curvas com maiores tendências de sofrerem ionização, podendo ser possivelmente utilizados como modelos para a ionização de moléculas e nanoestruturas com geometrias semelhantes às estudadas.

Palavras-chave: Runge-Kutta. Confinamento quântico. Curvas planas. Modo Zero.

ABSTRACT

The Schrödinger equation has been solved numerically by several Runge-Kutta methods. The study of this equation considering the system energy being zero, among several other applications, allows an analysis of the binding limit state of a particle in a given quantum system. Thus, in the present work we solve the equation in its zero mode, considering an extrinsic approach to confinement in a one-dimensional region, using the 4th order Runge-Kutta method most used for ODE solutions. Initially, we obtained numerically the wavefunctions for a particle confined in a straight line and in circles of different radius, as they are curved with parameterizations by arc length file. Then we study curves from their curvatures, which advises the study of confinement in Archimedean spirals and in logarithmic spirals. Finally, we study confinement in hypothetical curves that do not yet have defined parameterizations. The results obtained made it possible to analyze the regions in the curves with greater tendencies to occur ionization, which could be used as model for the ionization of molecules and nanostructures with geometries similar to those studied.

Keywords: Runge-Kutta. Quantic Constrain. Plane Curves. Zero Energy.

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	10
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	11
2.1 GEOMETRIA DIFERENCIAL DE CURVAS.....	11
2.1.1 Parametrização de curvas.....	11
2.1.2 Parametrização por comprimento de arco.....	13
2.1.3 Curvatura.....	13
2.2 EQUAÇÃO ESTACIONÁRIA DE SCHRÖDINGER.....	14
2.2.1 Modo zero.....	16
2.2.2 Interpretação probabilística da função de onda.....	16
2.3 MÉTODO DE RUNGE-KUTTA DE 4ª ORDEM (RK4).....	17
2.3.1 Método RK4 para EDOs de 2ª Ordem.....	18
3 OBJETIVOS	20
3.1 GERAL.....	20
3.2 ESPECÍFICOS.....	20
4 METODOLOGIA	21
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO	23
5.1 VALIDAÇÃO DO RK4.....	23
5.2 CURVAS DESCRITAS NA LITERATURA.....	24
5.2.1 Partícula com energia zero confinada em uma reta.....	24
5.2.2 Partícula com energia zero confinada em uma circunferência.....	26
5.3 CURVAS A PARTIR DA CURVATURA.....	28
5.3.1 Partícula com energia zero confinada em uma curva com $\int_{s_0}^s k(s) ds = \alpha \ln s$	28
5.3.2 Partícula com energia zero confinada em uma curva com $\int_{s_0}^s k(s) ds = \alpha\sqrt{s}$	32
5.4 CURVATURA DE CURVAS DESCONHECIDAS.....	37

5.4.1 Partícula com energia zero confinada em uma curva com $k(s) = \cos^\alpha(s)$	38
5.4.2 Partícula com energia zero confinada em uma curva com $k(s) = \sin^\alpha(s)$	39
5.4.3 Partícula com energia zero confinada em uma curva com $k(s) = s^\alpha$	40
5.4.4 Partícula com energia zero confinada em uma curva com $k(s) = \ln^\alpha(s)$	41
6 CONCLUSÃO	44
REFERÊNCIAS	45
APÊNDICE A – ALGORITMO UTILIZADO PARA A COMPARAÇÃO DO RK4 COM UMA EDO DE PRIMEIRA ORDEM E OUTROS MÉTODOS NUMÉRICOS	47
APÊNDICE B – ALGORITMO UTILIZADO PARA A COMPARAÇÃO DO RK4 COM UMA EDO DE SEGUNDA ORDEM E OUTROS MÉTODOS NUMÉRICOS	50
APÊNDICE C – ALGORITMO UTILIZADO PARA A RESOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER NO MODO ZERO UTILIZANDO O RK4	53

1 INTRODUÇÃO

Sistemas quânticos podem ser estudados utilizando a Equação Diferencial Ordinária (EDO) de segunda ordem nomeada como equação de Schrödinger estacionária, onde admitisse que o sistema não evolui com o tempo (SCHRÖDINGER, 1926 apud NUSSENZVEIG, 2014).

O operador Hamiltoniano da equação de Schrödinger deve ser modelado de acordo com o sistema em estudo. Uma possível abordagem é a modelagem intrínseca do operador, onde apenas a região que contém a partícula é considerada existente, já a abordagem extrínseca leva em consideração não apenas a região onde a partícula está confinada, mas também o ambiente no qual este sistema quântico está contido (SILVA, BASTOS e RIBEIRO, 2017).

Da Costa (1981) propõe um Hamiltoniano, extrinsecamente modelado, para o confinamento quântico unidimensional, onde o operador possui um termo potencial geométrico, dependente da curvatura da região, sendo este responsável pelo confinamento da partícula.

O modo zero da Equação de Schrödinger é dado quando a energia do sistema quântico em estudo é igual a zero. Este caso particular da equação tem sido estudado por apresentar aplicações físicas, como a descrição de sistemas com partículas ultrafrias (PADE, 2009), além de possibilitar a descoberta de termos potenciais que permitem estados com energia zero (KOBAYASHI E SHIMBORI, 2002), ou ainda, permitir o estudo do estado limite de ligação de uma partícula quântica confinada em uma certa região (DABOUL e NIETO, 1994).

Em muitos casos, Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs) ainda não possuem soluções analíticas obtidas ou apresentam soluções não triviais. Assim, métodos numéricos têm sido utilizados para solucionar EDOs nas mais diversas áreas do conhecimento. Dentre esses, destaca-se o método de Runge-Kutta de 4ª ordem (RK4) clássico, um método numérico de passo único comumente utilizado por possuir simples implementação e fornecer resultados efetivos (CHAPRAS e CANALE, 2016).

Diferentes métodos de Runge-Kutta têm sido desenvolvidos e implementados para a resolução de diversos casos particulares da equação de Schrödinger (ANASTASSI e SIMOS, 2007), porém não encontramos na literatura soluções para o modo zero da equação de Schrödinger, considerando a abordagem extrínseca dada por Da costa (1981) para o confinamento quântico unidimensional. Portanto, o presente trabalho pretende resolver numericamente a EDO que modela este problema, utilizando o RK4.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 GEOMETRIA DIFERENCIAL DE CURVAS

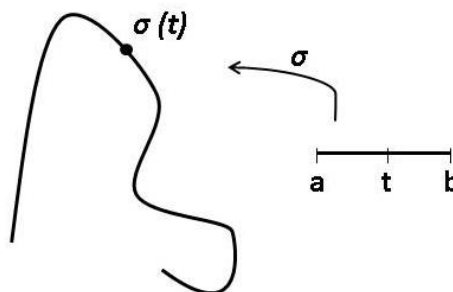
Nesta seção, abordaremos noções de geometria diferencial de curvas (DO CARMO, 2016), importantes para a compreensão do presente trabalho. Durante a discussão, as curvas contidas no \mathbb{R}^2 (PICADO, 2006) serão mais constantemente comentadas por integrarem os objetivos do trabalho.

Primeiramente, discorreremos acerca da parametrização de curvas, em seguida será discutida a parametrização por comprimento de arco e por fim será abordada a noção de curvatura.

2.1.1 Parametrização de curvas

No estudo da geometria analítica, uma curva é considerada como um subconjunto de pontos pertencentes ao \mathbb{R}^n , porém na geometria diferencial surge o conceito da parametrização de curvas contidas no \mathbb{R}^n , que consiste em abordar uma curva como a imagem de uma função σ que leva os pontos de um intervalo $[a, b]$ para o \mathbb{R}^n , como ilustra a Figura 1.

Figura 1– Parametrização de uma curva pela função σ .



Fonte: Autoria própria.

A função σ é contínua e diferenciável e pode ser definida formalmente como:

$$\sigma : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^n \quad (1)$$

Com a parametrização, os pontos da curva são dados por $\sigma(t)$, sendo $t \in [a, b]$.

Como a curva está inserida no \mathbb{R}^n , temos que:

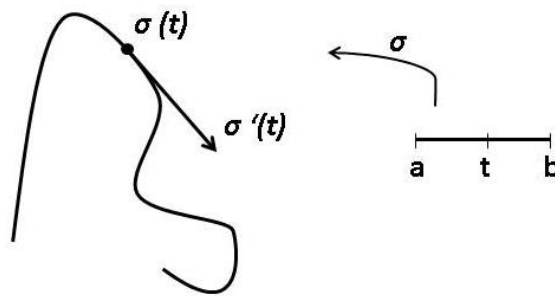
$$\sigma(t) = (x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)) \quad (2)$$

As chamadas funções coordenadas, $x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)$, são as coordenadas do ponto $\sigma(t)$ pertencente à curva e agem como funções de t , pois levam um ponto no intervalo $[a, b]$ a um número real.

Como a função σ é diferenciável, é possível encontrar o vetor tangente em $\sigma(t)$, dado na equação 3 e representado na Figura 2.

$$\sigma'(t) = (x_1'(t), x_2'(t), \dots, x_n'(t)) \quad (3)$$

Figura 2– Curva parametrizada pela função σ com vetor tangente a curva, $\sigma'(t)$, no ponto $\sigma(t)$.

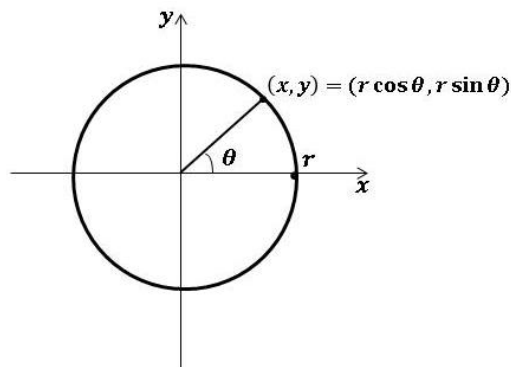


Fonte: Autoria própria.

Para exemplificar a parametrização de uma curva, podemos considerar uma circunferência contida no plano, com raio r e centro na origem do plano cartesiano, Figura 3. Se abordarmos a curva como subconjunto do plano, temos sua definição como:

$$\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2, x^2 + y^2 = r^2 \} \quad (4)$$

Figura 3– Circunferência contida no \mathbb{R}^2 , com raio r e centro na origem do plano cartesiano.



Fonte: Autoria própria.

Contudo, podemos considerar a curva como resultado da parametrização pelo ângulo θ , formado entre r e o eixo x do plano cartesiano, assim:

$$\sigma(\theta) = (r \cos \theta, r \sin \theta) \quad (5)$$

Com isso parametrizamos a circunferência, utilizando a função σ , que leva pontos do intervalo que contém θ para o \mathbb{R}^2 .

$$\sigma : [0, 2\pi] \rightarrow \mathbb{R}^2 \quad (6)$$

É também possível obter o vetor tangente ao ponto $\sigma(\theta)$, dado por:

$$\sigma'(\theta) = (-r \sin \theta, r \cos \theta) \quad (7)$$

2.1.2 Parametrização por comprimento de arco

Para uma dada curva parametrizada, $\sigma : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^n$, com $t \in [a, b]$, podemos definir seu comprimento como:

$$L(\sigma) = \int_a^b \|\sigma'(t)\| dt \quad (8)$$

Dizemos que $\sigma : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^n$ é uma curva parametrizada pelo comprimento de arco se:

$$L(\sigma|_{[a,t]}) = t - a \quad \forall t \in [a, b] \quad (9)$$

Ou seja, a distância de a até t , no intervalo, é exatamente o comprimento de $\sigma(a)$ até $\sigma(t)$, na curva. Portanto, a partir das equações 8 e 9, temos que σ é curva parametrizada pelo comprimento de arco se, e somente se, o vetor tangente à curva tem comprimento constante igual a 1.

$$\|\sigma'(t)\| = 1 \quad \forall t \in [a, b] \quad (10)$$

Note que apenas curvas regulares, isto é $\sigma'(t) \neq 0$ para todo $t \in [a, b]$, podem ser parametrizadas por comprimento de arco.

É comumente adotada a variável s para curvas parametrizadas por comprimento de arco. Neste texto adotaremos esta convenção.

2.1.3 Curvatura

A curvatura, $k(t)$, de uma curva plana $\sigma(t)$, pode ser entendida como uma medida do quanto a curva se afasta de estar contida em uma reta.

Para uma curva parametrizada por comprimento de arco, sua curvatura em um dado ponto $\sigma(s)$ equivale a taxa de variação do vetor tangente à curva, ou seja, o módulo da segunda derivada da curva neste ponto.

$$k(s) = \|\sigma''(s)\| \quad (11)$$

O teorema fundamental das curvas planas garante que dada uma curvatura existe uma única curva plana associada e vice-versa, a menos de sua rotação. Como consequência, podemos encontrar a parametrização de uma curva plana a partir de sua curvatura da seguinte forma (PICADO, 2006):

$$\sigma(s) = \left(\int_{s_0}^s \cos \left(\int_{s_0}^s k(s) ds \right) ds, \int_{s_0}^s \sin \left(\int_{s_0}^s k(s) ds \right) ds \right) \quad (12)$$

2.2 EQUAÇÃO ESTACIONÁRIA DE SCHRÖDINGER

A equação estacionária de Schrödinger (1926, apud NUSSENZVEIG, 2014) é uma equação de autovalor comumente utilizada nos estudos de sistemas quânticos que não evoluem com o tempo. Nesta equação o operador Hamiltoniana o (\hat{H}) é aplicado sobre uma função de onda (Ψ), resultando na energia associada ao sistema, E , e na própria Ψ , o que faz com que esta seja uma autofunção na equação (LIMA, 2014).

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (13)$$

A equação 13 é o equivalente quântico da equação clássica de energia total de um sistema, assim o Hamiltoniano é o resultado da soma de outros dois operadores representantes da energia cinética (\hat{V}) e da energia potencial (\hat{K}) do sistema em estudo (NUSSENZVEIG, 2014).

$$\hat{H} = \hat{V} + \hat{K} \quad (14)$$

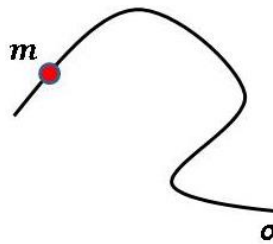
Com isso, o operador \hat{H} deve ser modelado de acordo com o sistema quântico a ser estudado, uma vez que cada Hamiltoniano fornece um espectro de energia dado por E .

Como exemplo, temos o problema da partícula confinada em uma curva σ contida no espaço Euclidiano. Neste sistema o Hamiltoniano pode ser modelado considerando a abordagem intrínseca, onde se considera que existe apenas o sistema da região do confinamento e a região que o contém não é abordada (BASTOS et al, 2012), como representado na figura 4. Nesta abordagem o operador \hat{H} é composto apenas pelo termo cinético:

$$\hat{H} = \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{ds^2} \quad (15)$$

Onde \hbar é a constante reduzida de Planck ($h/2\pi$), m é a massa efetiva dessa partícula e s é a variável comprimento de arco.

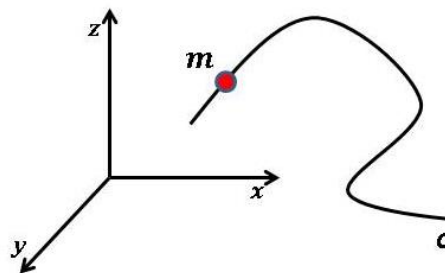
Figura 4 – Representação da abordagem intrínseca para o confinamento unidimensional de uma partícula com massa específica m na região σ .



Fonte: Autoria própria

Contudo, ainda considerando o mesmo sistema, podemos utilizar a abordagem extrínseca para a modelagem do Hamiltoniano, onde a existência do ambiente no qual está inserido o sistema em questão é levada em consideração. Como na figura 5, onde tanto o espaço euclidiano tridimensional, ao qual σ pertence, quanto a própria curva σ , que contém a partícula, são abordados.

Figura 5 – Representação da abordagem extrínseca para o confinamento unidimensional de uma partícula com massa específica m na região σ contida no espaço euclidiano tridimensional.



Fonte: Autoria própria

Uma modelagem extrínseca deste problema foi desenvolvida por Da Costa (1981). Nesta, a partícula está confinada em uma curva ou superfície imersa no espaço Euclidiano, e o confinamento é mantido por um potencial atrativo presente sobre toda a região. Este potencial é sensível à variação da curvatura da curva, $k(s)$.

Assim, o Hamiltoniano proposto por Da Costa para uma partícula confinada em uma curva tem seu termo cinético sendo o mesmo da abordagem intrínseca, porém possui ainda um termo de potencial geométrico dependente de $k(s)$.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{ds^2} - \frac{\hbar^2}{8m} k(s)^2 \quad (16)$$

2.2.1 Modo zero

O modo zero da equação Schrödinger é dado quando a energia do sistema quântico é zero, $E = 0$.

O estudo da equação neste modo, além de tornar mais simples a sua resolução, modela sistemas físicos existentes (MAKOWSKI e GÓRSKA, 2006).

Uma importante consequência em abordar o modo zero da equação Schrödinger no contexto do presente trabalho é a possibilidade do estudo do estado limite de ligação de uma partícula (DABOUL e NIETO, 1994).

Geralmente sistemas com $E < 0$ são tidos como estados ligados, já sistemas com $E > 0$ são tratados como estados não ligados. Assim, uma possível interpretação para sistemas com $E = 0$ é a de se tratar da transição do estado ligado para o estado não ligado. Entretanto, neste estado transitório já é possível definir qual o estado de ligação existente.

A função de onda que rege o sistema quântico com $E = 0$ determinará o estado de ligação do sistema (DABOUL e NIETO, 1994). Se $\Psi(x) \rightarrow 0$ com $x \rightarrow \pm\infty$, ou com $x \rightarrow 0$ e $x \rightarrow L$, para um sistema confinado em uma região com tamanho L e início em $x = 0$, temos o estado ligado. Caso contrário, trata-se de um sistema com estado não ligado.

2.2.2 Interpretação probabilística da função de onda

Em 1928, Max Born propôs uma interpretação física para a função de onda de uma certa partícula, $\Psi(x)$ no caso unidimensional estacionário. Nesta interpretação (NUSSENZVEIG, 2014), a probabilidade de encontrar uma partícula quântica numa região entre x e $x + dx$ é dado pelo produto entre o quadrado do módulo da função de onda com dx :

$$P(x) dx = |\Psi(x)|^2 dx \quad (17)$$

onde $P(x)$ é a densidade de probabilidade em x .

Assim, a área sob $|\Psi(x)|^2$ em uma região de x_0 a x determina a probabilidade de se encontrar a partícula quântica, regida por $\Psi(x)$, nesta região:

$$\int_{x_0}^x P(x) dx = \int_{x_0}^x |\Psi(x)|^2 dx \quad (18)$$

2.3 MÉTODO DE RUNGE-KUTTA DE 4ª ORDEM (RK4)

O método Runge-Kutta de ordem 4 é um dos métodos numéricos de passo único (CHAPRAS e CANALE, 2016). Esses métodos se caracterizam por partirem de um ponto inicial conhecido $(x_0; y_0)$ para, através do cálculo da inclinação φ , calcular-se os pontos seguintes pertencente à curva que resolve a equação diferencial ordenada (EDO) em estudo, da seguinte maneira:

$$y_i = y_{i-1} + \varphi h \quad (19)$$

Onde i é um número pertencente ao conjunto dos números naturais de 1 a n que indica o atual par ordenado que está se está calculando, sendo n o número de pontos que se deseja encontrar. O passo, h , equivale a distância entre a abcissa de um ponto qualquer (x_{i-1}) e a abcissa do ponto seguinte (x_i) que se pretende calcular. Assim como o ponto inicial $(x_0; y_0)$, todos estes parâmetros devem ser previamente determinados para a implementação do método de passo único escolhido.

$$x_i = x_{i-1} + h \quad (20)$$

Nos métodos de passo único, o ponto seguinte é sempre calculado a partir da inclinação φ da reta que passa pelo ponto anteriormente calculado. Quanto melhor o método, maior será a aproximação entre o valor estimado e o valor exato, porém normalmente desconhecemos este último. A maneira como φ é calculada é o que difere os métodos de passo único.

No método Runge-Kutta de ordem 4, em específico, são calculadas 4 inclinações (φ_1 , φ_2 , φ_3 e φ_4) para então calcular-se a média ponderada destas, obtendo-se assim a inclinação φ .

Consideremos uma EDO de primeira ordem, dada de forma genérica na equação 21.

$$\frac{dy}{dx} = g(x; y) \quad (21)$$

Existem infinitos possíveis métodos RK4 para a resolução numérica desta EDO, contudo no mais utilizado a inclinação φ_1 é calculada no início do intervalo atual, em seguida, partindo de φ_1 , calcula-se φ_2 na metade do intervalo estudado $(x_{i-1} + h/2)$. Utilizando φ_2 encontra-se uma terceira inclinação, φ_3 , também na metade do intervalo, e finalmente, de posse da inclinação φ_3 , calculamos a quarta inclinação, φ_4 , no fim do intervalo atual $(x_{i-1} + h$ ou $x_i)$.

$$\varphi_1 = g(x_{i-1}; y_{i-1}) \quad (22)$$

$$\varphi_2 = g\left(x_{i-1} + \frac{h}{2}; y_{i-1} + \varphi_1 \frac{h}{2}\right) \quad (23)$$

$$\varphi_3 = g\left(x_{i-1} + \frac{h}{2}; y_{i-1} + \varphi_2 \frac{h}{2}\right) \quad (24)$$

$$\varphi_4 = g(x_{i-1} + h; y_{i-1} + \varphi_3 h) \quad (25)$$

Para o cálculo da inclinação utilizada para encontrar o próximo ponto (φ), obtemos a média ponderada das inclinações encontradas anteriormente, considerando φ_1 e φ_4 com peso igual a 1 e φ_2 e φ_3 com peso igual a 2.

$$\varphi = \frac{\varphi_1 + 2\varphi_2 + 2\varphi_3 + \varphi_4}{6} \quad (26)$$

De posse da inclinação φ , a ordenada do ponto a ser calculado é encontrada utilizando a equação 19. Repetindo-se esta metodologia n vezes, encontram-se todos os pares ordenados desejados através do método RK4.

2.3.1 Método RK4 para EDOs de 2ª Ordem

Para resolver numericamente uma EDO de ordem superior, precisamos transformá-la em um sistema de EDOs de primeira ordem (FRANCO, 2006). Vejamos o caso da transformação de uma EDO de segunda ordem, dada de forma genérica por:

$$\frac{d^2y}{dx^2} = g\left(x; y; \frac{dy}{dx}\right) \quad (27)$$

Podemos definir uma variável auxiliar z , onde:

$$z = \frac{dy}{dx} \quad (28)$$

$$\frac{dz}{dx} = \frac{d^2y}{dx^2} \quad (29)$$

Com isso, obtivemos um sistema com duas EDOs de primeira ordem:

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = z = g_y(x; y; z) \\ \frac{dz}{dx} = g\left(x; y; \frac{dy}{dx}\right) = g_z(x; y; z) \end{cases} \quad (30)$$

De posse do sistema, determinamos um intervalo de estudo $[x_0, x_n]$, um passo h e as condições iniciais $y(x_0) = y_0$ e $z(x_0) = y_0$ para implementarmos o método RK4 da seguinte maneira:

$$y_i = y_{i-1} + \frac{h}{6}(\varphi_{1y} + 2\varphi_{2y} + 2\varphi_{3y} + \varphi_{4y}) \quad (31)$$

$$z_i = z_{i-1} + \frac{h}{6}(\varphi_{1z} + 2\varphi_{2z} + 2\varphi_{3z} + \varphi_{4z}) \quad (32)$$

Onde:

$$\varphi_{1y} = g_y(x_{i-1}; y_{i-1}; z_{i-1}) \quad (33)$$

$$\varphi_{1z} = g_z(x_{i-1}; y_{i-1}; z_{i-1}) \quad (34)$$

$$\varphi_{2y} = g_y\left(x_{i-1} + \frac{h}{2}; y_{i-1} + \varphi_{1y} \frac{h}{2}; z_{i-1} + \varphi_{1z} \frac{h}{2}\right) \quad (35)$$

$$\varphi_{2z} = g_z\left(x_{i-1} + \frac{h}{2}; y_{i-1} + \varphi_{1y} \frac{h}{2}; z_{i-1} + \varphi_{1z} \frac{h}{2}\right) \quad (36)$$

$$\varphi_{3y} = g_y\left(x_{i-1} + \frac{h}{2}; y_{i-1} + \varphi_{2y} \frac{h}{2}; z_{i-1} + \varphi_{2z} \frac{h}{2}\right) \quad (37)$$

$$\varphi_{3z} = g_z\left(x_{i-1} + \frac{h}{2}; y_{i-1} + \varphi_{2y} \frac{h}{2}; z_{i-1} + \varphi_{2z} \frac{h}{2}\right) \quad (38)$$

$$\varphi_{4y} = g_y(x_{i-1} + h; y_{i-1} + \varphi_{3y} h; z_{i-1} + \varphi_{3z} h) \quad (39)$$

$$\varphi_{4z} = g_z(x_{i-1} + h; y_{i-1} + \varphi_{3y} h; z_{i-1} + \varphi_{3z} h) \quad (40)$$

3 OBJETIVOS

3.1 GERAL

Resolver numericamente a equação estacionária de Schrödinger com energia zero para o confinamento unidimensional utilizando o método Runge-Kutta de 4ª ordem.

3.2 ESPECÍFICOS

- Calcular parametrizações por comprimento de arco para curvas planas a partir de suas curvaturas;
- Calcular numericamente o confinamento eletrônico extrínseco em curvas planas a partir de suas curvaturas;
- Analisar as regiões com maiores probabilidades de se encontrar elétrons ionizáveis nas curvas estudadas.

4 METODOLOGIA

Inicialmente automatizamos o método Runge-Kutta de 4ª ordem para EDOs de primeira e segunda ordem, vide seção 2.3 e 2.3.1, utilizando um algoritmo desenvolvido no programa Scilab versão 6.1.0.

Em seguida, adaptamos o método para a EDO que modela o confinamento extrínseco unidimensional, dado por Da Costa, para uma partícula no modo zero de energia. Os algoritmos utilizados para obtenção dos resultados são apresentados nos Apêndices.

De posse do RK4 automatizado, resolvemos numericamente duas EDOs, de primeira e segunda ordem, e comparamos com suas soluções analíticas, visando a validação do método. Nesse estudo ainda foram utilizados outros métodos numéricos de passo único para comparação com o RK4. Os parâmetros numéricos utilizados para a resolução das duas EDOs estudadas são explicitados na tabela 1.

Tabela 1 – Parâmetros numéricos utilizados para a validação do RK4 automatizado.

Ordem da EDO	$s_{inicial}$	s_{final}	$\Psi(s_{inicial})$	$\frac{d\Psi(s_{inicial})}{ds}$	h
1ª	-3,9	3,9	0,0004977	-	0,1
2ª	0	4	3	2	0,2

Fonte: Autoria própria.

Encontramos curvas com parametrizações por comprimento de arco e curvaturas já conhecidas na literatura. Utilizamos as curvaturas encontradas para a resolução numérica da EDO estudada através do método de RK4.

Encontramos ainda, curvaturas não descritas na literatura que permitem tanto a resolução numérica da EDO em questão, como o cálculo da parametrização por comprimento de arco da curva à qual a curvatura pertence, equação 12.

Por fim, curvaturas que permitem a resolução numérica da EDO em estudo, mas que impossibilitam a solução analítica da parametrização por comprimento de arco de suas curvas, também foram estudadas.

Para algumas curvaturas estudadas implementamos um parâmetro α , o que permitiu a análise do efeito do aumento numérico da função curvatura, de um dado tipo de curva plana, na função de onda que rege a partícula com energia zero confinada nesta curva.

A análise da densidade eletrônica a partir das resoluções numéricas foi feita de maneira qualitativa.

Todos os gráficos foram gerados utilizando o programa Origin 2018. Os parâmetros numéricos utilizados para a implementação do método de RK4 em todos os casos estudados estão dados na tabela 2.

Tabela 2 – Parâmetros numéricos utilizados para cada curvatura estudada.

$k(s)$	$s_{inicial}$	s_{final}	$\Psi(s_{inicial})$	$\frac{d\Psi(s_{inicial})}{ds}$	h
0	0	100	0	1	0,1
$\frac{1}{\rho}$	0	700	0	1	1
$\frac{\alpha}{s}$	0,1	10000	0	1	5
$\frac{\alpha}{2\sqrt{s}}$	0,1	2000	0	1	1
$\cos^\alpha s$	0	120	0	1	0,1
$\sen^\alpha s$	0	120	0	1	0,1
s^α	0	10	0	1	0,01
$\ln^\alpha(s)$	0,1	50	0	1	0,1

Fonte: Autoria própria.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Admitimos $E = 0$ na equação estacionária de Schrödinger, equação 13, e adotamos o Hamiltoniano proposto por da Costa para o confinamento quântico unidimensional, equação 16. Deste modo, obtemos a equação que modela o problema da partícula no modo zero confinada em uma curva plana:

$$\frac{d^2\Psi(s)}{ds^2} = -\frac{k(s)^2}{4}\Psi(s) \quad (41)$$

Solucionamos numericamente a equação 41 para algumas funções curvaturas, utilizando o Rk4.

5.1 VALIDAÇÃO DO RK4

Visando o aprendizado e validação do RK4 escolhemos arbitrariamente duas EDOs com soluções analíticas conhecidas, sendo uma de primeira ordem e outra de segunda ordem, dadas na tabela 3, e comparamos com suas respectivas soluções numéricas calculadas por alguns métodos de passo único além do RK4: método de Euler, método de Heun e o método do ponto médio, figura 6.

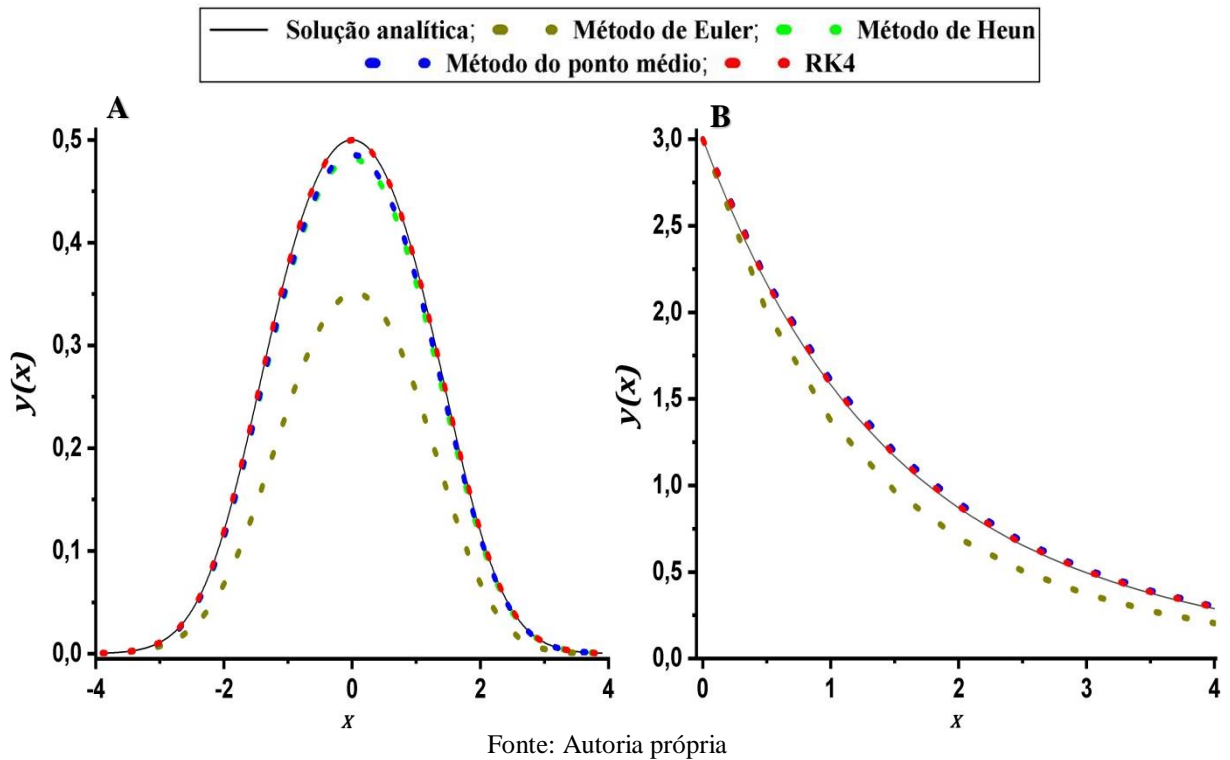
Tabela 3 – EDOs estudadas para validação do método e suas respectivas soluções analíticas.

EDO	Solução Analítica
$\frac{dy}{dx} = xy^2 - xy$	$y = \frac{1}{1 + e^{\frac{x^2}{2}}}$
$2 \frac{d^2y}{dx^2} = -3 \frac{dy}{dx} - y$	$y = e^{-x} + 2e^{\frac{-x}{2}}$

Fonte: Polyanin e Zaitsev (2003).

A EDO de primeira ordem estudada é um exemplo de equação de Bernoulli, utilizada no estudo de mecânica dos fluídos (FOX et al., 2018), já a EDO de segunda ordem pode modelar, por exemplo, um sistema massa-mola de oscilação livre e com amortecimento (NUSSENZVEIG, 2014).

Figura 6 – Soluções analíticas e numéricas para as EDOs de primeira ordem (A) e de segunda ordem (B).



Analisando os resultados expostos na figura 6, nota-se que o RK4 é o método numérico, dentre os métodos de passo único utilizados, que fornece resultados mais próximos das soluções analíticas das EDOs de primeira e de segunda ordem.

5.2 CURVAS DESCRITAS NA LITERATURA

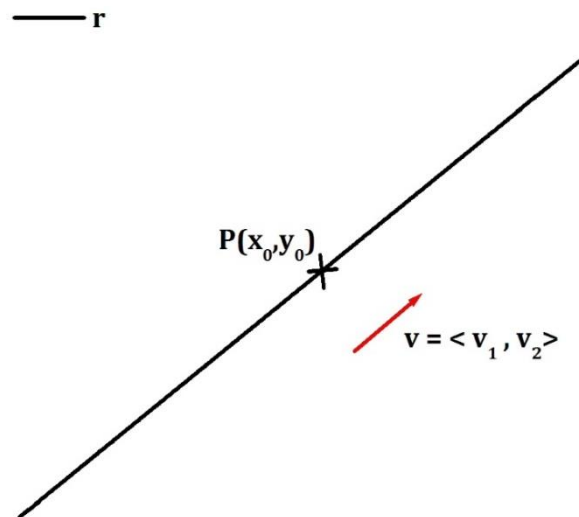
Nesta seção pretendemos resolver numericamente o nosso problema considerando as curvas com parametrizações por comprimento de arco e curvatura já descritas na literatura. As curvas encontradas foram a reta e a circunferência.

5.2.1 Partícula com energia zero confinada em uma reta

Parametrizando uma reta r contida no \mathbb{R}^2 , $y = ax + b$, paralela ao vetor $v = \langle v_1, v_2 \rangle$ que passa pelo ponto $P(x_0, y_0)$, figura 7, por comprimento de arco, tem-se:

$$\sigma(s) = \left(x_0 + \frac{sv_1}{\sqrt{v_1^2 + v_2^2}}, y_0 + \frac{sv_2}{\sqrt{v_1^2 + v_2^2}} \right) \quad (42)$$

Figura 7 – Reta paralela ao vetor v e passando pelo ponto P .



Fonte: Autoria própria.

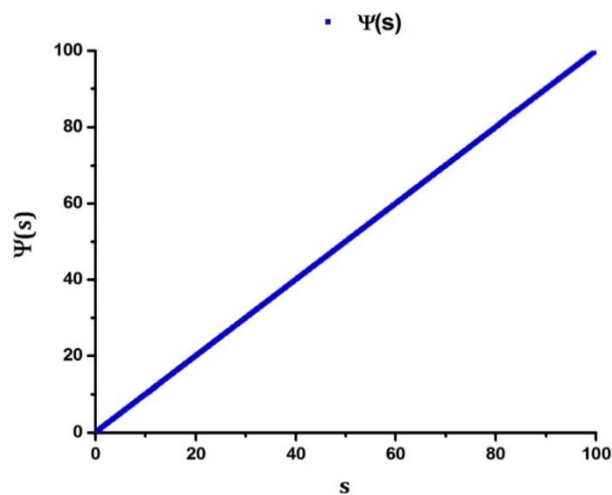
Para qualquer reta $k(s) = 0$ (DO CARMO, 2016), com isso a EDO que modela uma partícula com energia zero confinada nesta curva se torna:

$$\frac{d^2\psi(s)}{ds^2} = 0 \quad (43)$$

A equação 43 é nomeada equação de Laplace unidimensional. Tal equação também modela o problema da distribuição de potencial entre dois pontos e tem como solução analítica uma reta (FONTANA, 2010).

Resolvemos a equação 43 utilizando o método Runge-Kutta de 4ª ordem, figura 8.

Figura 8 – Resolução numérica para uma partícula com energia zero em uma reta.



Fonte: Autoria própria.

Como o RK4 é implementado em um intervalo definido de s , a região estudada para o confinamento da partícula é um segmento de reta.

A função $\Psi(s)$ se comporta como uma reta, como previsto pela literatura (FONTANA, 2010).

Como $\Psi(s)$ não atende a condição de contorno $\Psi(0) = 0$ e $\Psi(l) = 0$, o resultado indica que a partícula, quando com energia zero, não se encontra mais confinada na reta. Porém, o Hamiltoniano modelado por Da Costa (1981), utilizado na modelagem do problema estudado, pressupõe o confinamento quântico da partícula.

Com isso, o resultado encontrado aponta que não é possível confinar uma partícula quântica com energia zero em uma molécula ou nanoestrutura com geometria semelhante à de uma reta, ou seja, a ionização nestas estruturas deve acontecer em uma energia ainda negativa do sistema.

5.2.2 Partícula com energia zero confinada em uma circunferência

Uma circunferência qualquer c , $(y-y_0)^2 + (x-x_0)^2 = \rho^2$, tem centro em (x_0, y_0) , e raio ρ . Parametrizando c por comprimento de arco s , tem-se:

$$\sigma(s) = \left(x_0 + \rho \cos \frac{s}{\rho}, y_0 + \rho \sin \frac{s}{\rho} \right) \quad (44)$$

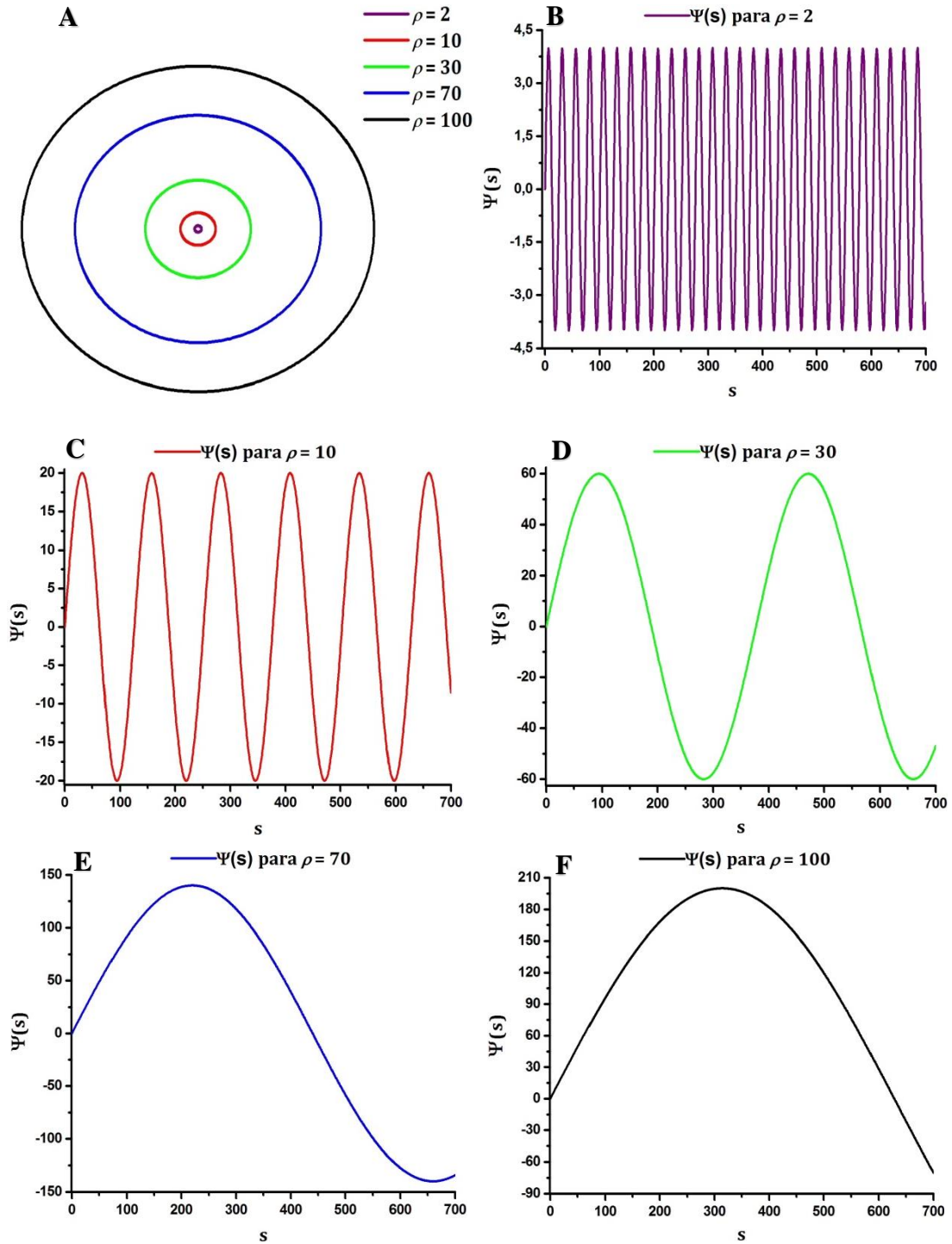
Para toda circunferência de raio ρ , $k(s) = \frac{1}{\rho}$ (DO CARMO, 2016). Assim, a EDO que modela o problema do confinamento extrínseco no modo zero em uma circunferência é dada por:

$$\frac{d^2\Psi(s)}{ds^2} = -\frac{1}{4\rho^2}\Psi(s) \quad (45)$$

Para a obtenção do gráfico da $\Psi(s)$ que resolve a EDO numericamente, foram estudadas 5 circunferências com centro em (x_0, y_0) e $\rho = 2; 10; 30; 70$ e 100 , o que tornou possível a análise do comportamento de $\Psi(s)$ com a variação estudada do raio ρ , figura 9.

Analisando os gráficos da figura 9, todas as funções de onda apresentaram um comportamento senoidal, com aumento da frequência e amplitude de onda de acordo com o aumento de ρ .

Figura 9 – Circunferências com $\rho = 2; 3; 4$ e 5 (A) e as respectivas $\Psi(s)$ (B, C, D, E e F) para uma partícula no modo zero confinada às circunferências de A.



Fonte: Autoria própria.

Como consequência da interpretação da função de onda dada por Max Born (NUSSENZVEIG, 2014), podemos analisar qualitativamente a densidade eletrônica pelo

gráfico da função de onda. Dado que as áreas dos picos da função de onda em um dado ρ são iguais, as regiões com maiores densidades eletrônicas, nas circunferências estudadas, tendem a ser equidistantes.

Por representarem o caso de uma partícula confinada com energia zero, os resultados expostos podem modelar as regiões com maiores tendências a sofrerem ionização em moléculas ou nanoestruturas com geometria semelhante à circunferência.

5.3 CURVAS A PARTIR DA CURVATURA

Nesta seção discutiremos os resultados numéricos obtidos partindo das curvaturas que possibilitaram tanto a solução numérica da equação 41, quanto a resolução analítica das integrais na equação 12, o que permitiu que encontrássemos as curvas a que as curvaturas pertenciam.

5.3.1 Partícula com energia zero confinada em uma curva com $\int_{s_0}^s k(s) ds = \alpha \ln s$

Consideramos inicialmente $\int_{s_0}^s k(s) ds = \alpha \ln s$, sendo α um número real positivo. Assim a função curvatura é dada por:

$$k(s) = \frac{\alpha}{s} \quad (46)$$

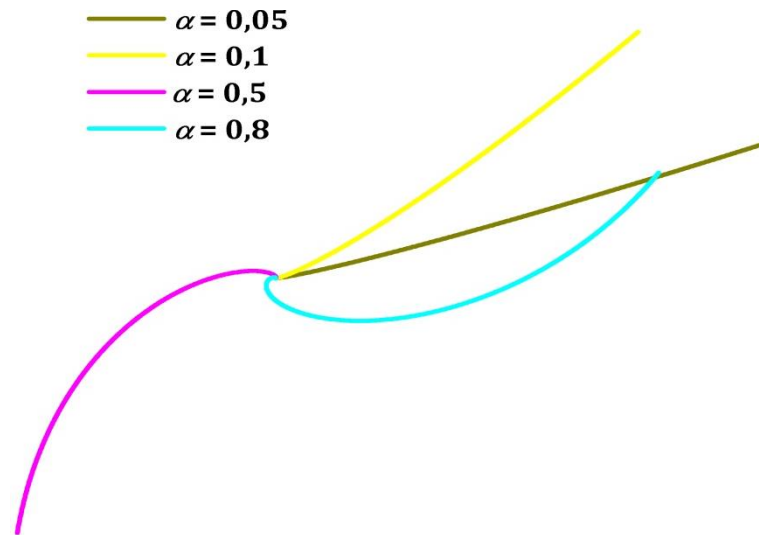
De posse da curvatura, resolvemos as integrais da equação 12 para obter a parametrização por comprimento de arco da curva a qual a curvatura da equação 46 pertence:

$$\sigma(s) = \left(\frac{s}{\alpha^2 + 1} (\alpha \sin(\alpha \ln s) + \cos(\alpha \ln s)), \right. \\ \left. \frac{s}{\alpha^2 + 1} (\sin(\alpha \ln s) - \alpha \cos(\alpha \ln s)) \right) \quad (47)$$

Visando entender as mudanças causadas por α na curva, variamos os valores deste parâmetro inicialmente entre 0 e 1, $\alpha = 0,05; 0,1; 0,5$ e $0,8$. As curvas encontradas são dadas na figura 10.

Os valores $\alpha = 0,05$ e $0,1$ resultam em curvas que se aproximam a retas. Com o aumento do parâmetro há também um aumento da inclinação da reta fazendo com que a curva tenda a se tornar uma espiral, evidenciada na curva com $\alpha = 0,8$.

Figura 10 – Curvas com $k(s) = \frac{\alpha}{s}$ para valores de α entre 0 e 1.



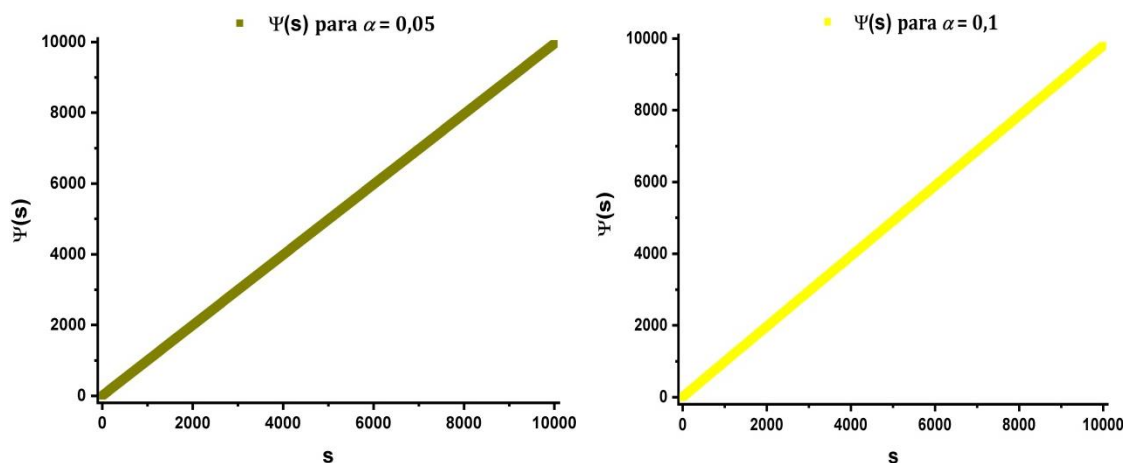
Fonte: Autoria própria.

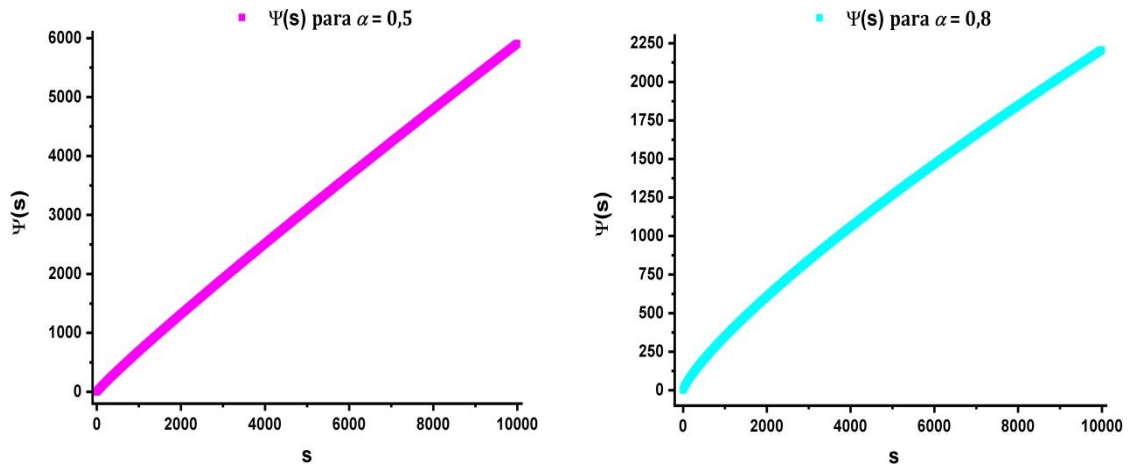
Considerando $k(s) = \frac{\alpha}{s}$, a equação que modela uma partícula no modo zero confinada nas curvas com este tipo curvatura se dá por:

$$\frac{d^2\Psi(s)}{ds^2} = -\frac{\alpha^2}{4s^2}\Psi(s) \quad (48)$$

Resolvemos numericamente esta EDO utilizando o RK4 para as curvas da figura 10. Os gráficos obtidos para $\Psi(s)$ são explicitados na figura 11.

Figura 11 – Gráficos de $\Psi(s)$ para $k(s) = \frac{\alpha}{s}$ com valores de α entre 0 e 1.





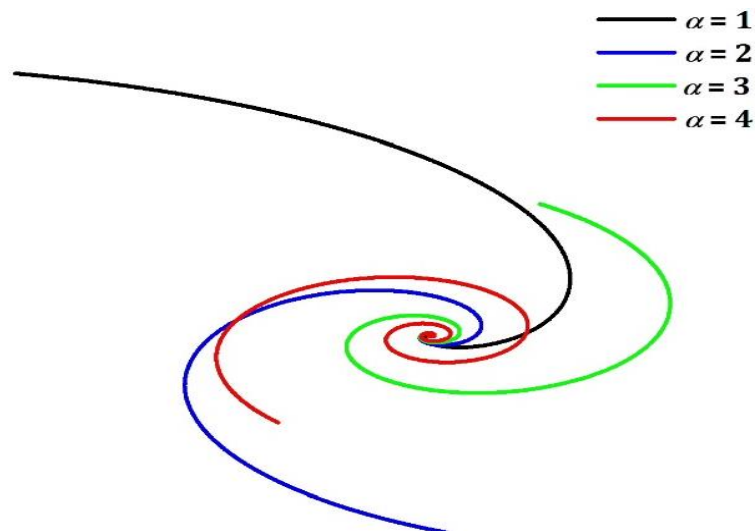
Fonte: Autoria própria.

Os gráficos da figura 11 mostram que para $\alpha = 0,05$ e $0,1$, as funções assemelham-se a uma reta. Estes resultados são esperados, como visto na seção 4.2.1, já que a curva em que a partícula está confinada nestes casos também aproximasse da reta. Já para os casos em que $\alpha = 0,5$ e $0,8$, as funções de onda apresentam uma tendência a tornarem-se funções logarítmicas.

Contudo, em todos esses casos, como na seção 4.2.1, as funções de onda não atendem a condição de contorno, indicando que não é possível confinar uma partícula no estado zero de energia nestas curvas.

Em seguida admitimos $\alpha = 1; 2; 3$ e 4 , e plotamos as curvas, utilizando a equação 47, figura 12.

Figura 12 – Curvas com $k(s) = \frac{\alpha}{s}$ para valores de α de 1 a 4.



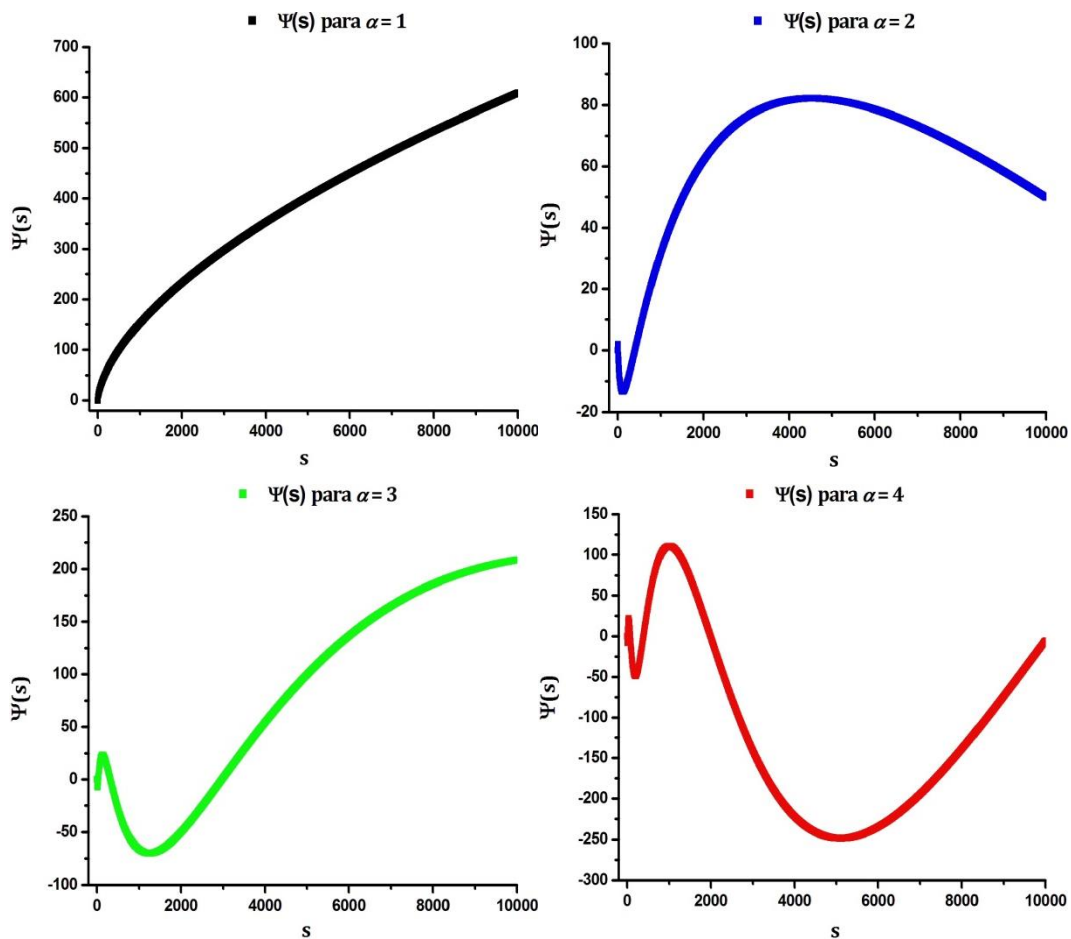
Fonte: Autoria própria

Nestes casos, as curvas encontradas tendem à formação de uma espiral, contudo, como esperado, com o aumento de α , tem-se um aumento da curvatura, fazendo com que a curva assumira a forma espiralada mais rapidamente.

Nas espirais em que $\alpha = 2; 3$ e 4 , a linha que atravessa o polo encontra a curva em distâncias que obedecem a uma progressão geométrica, o que indica que essas curvas sejam exemplos de espirais logarítmicas (LOCKWOOD, 1961).

Resolvemos numericamente a equação 48 para as curvas da figura 12. Os gráficos da função de onda, figura 13, demonstram que para $\alpha = 1$ há um comportamento ainda semelhante a uma função logarítmica, entretanto para $\alpha = 2; 3$ e 4 apresenta-se um comportamento senoidal.

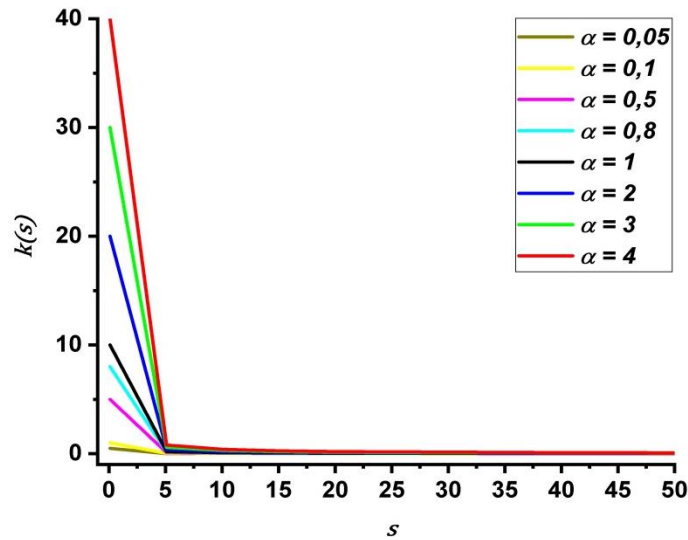
Figura 13 – Gráficos de $\Psi(s)$ para $k(s) = \frac{\alpha}{s}$ com valores de α de 1 a 4.



Fonte: Autoria própria

Nas funções de onda senoidais, há um aumento da amplitude e do comprimento de onda com o aumento de s . Como, no caso em estudo, $k(s)$ e s são inversamente proporcionais, os maiores valores de s são dados nas regiões de menores curvaturas, figura 14.

Figura 14 – Gráficos de $k(s) = \frac{\alpha}{s}$ para os valores de α estudados.



Fonte: Autoria Própria

Com isso, os resultados indicam que os elétrons mais ionizáveis, em estruturas químicas com geometria de espiral logarítmica, devem se encontrar nas regiões mais afastadas do centro da espiral.

5.3.2 Partícula com energia zero confinada em uma curva com $\int_{s_0}^s k(s) ds = \alpha\sqrt{s}$

Partindo de $\int_{s_0}^s k(s) ds = \alpha\sqrt{s}$ temos que:

$$k(s) = \frac{\alpha}{2\sqrt{s}} \quad (49)$$

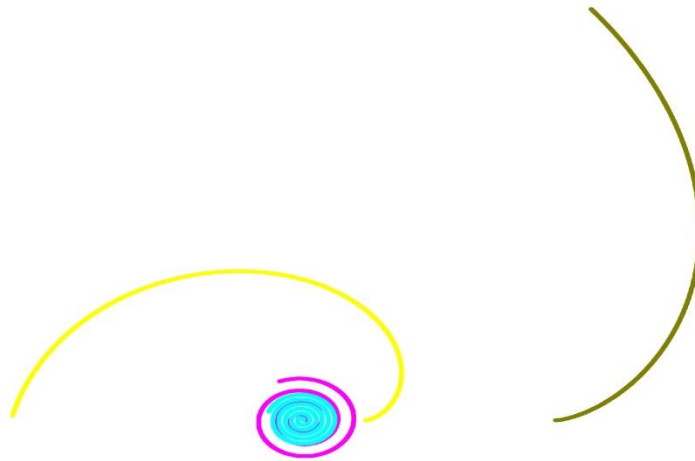
Resolvendo as integrais da equação 12 com a curvatura da equação 49, obtemos:

$$\sigma(s) = \left(\frac{2}{\alpha^2} (\alpha\sqrt{s} \operatorname{sen}(\alpha\sqrt{s}) + \cos(\alpha\sqrt{s})), \right. \\ \left. \frac{2}{\alpha^2} (\operatorname{sen}(\alpha\sqrt{s}) - \alpha\sqrt{s} \cos(\alpha\sqrt{s})) \right) \quad (50)$$

A figura 15 apresenta as curvas parametrizadas pela equação 50, considerando $\alpha = 0,05; 0,1; 0,5$ e $0,8$. Com o aumento de α as curvas tendem à formação de uma espiral, sendo esta forma assumida em $\alpha = 0,5$ e $0,8$. Como esperado, na curva com $\alpha = 0,8$, nota-se uma formação mais acelerada da espiral, dado que esta apresenta os maiores valores para $k(s)$ dentre os valores de α estudados.

As espirais encontradas apresentam voltas sucessivas espaçadas igualmente, o que indica que as curvas são exemplos de espirais de Arquimedes (LOCKWOOD, 1961).

Figura 15 – Curvas com $k(s) = \frac{\alpha}{2\sqrt{s}}$ para valores de α entre 0 e 1



Fonte: Autoria própria.

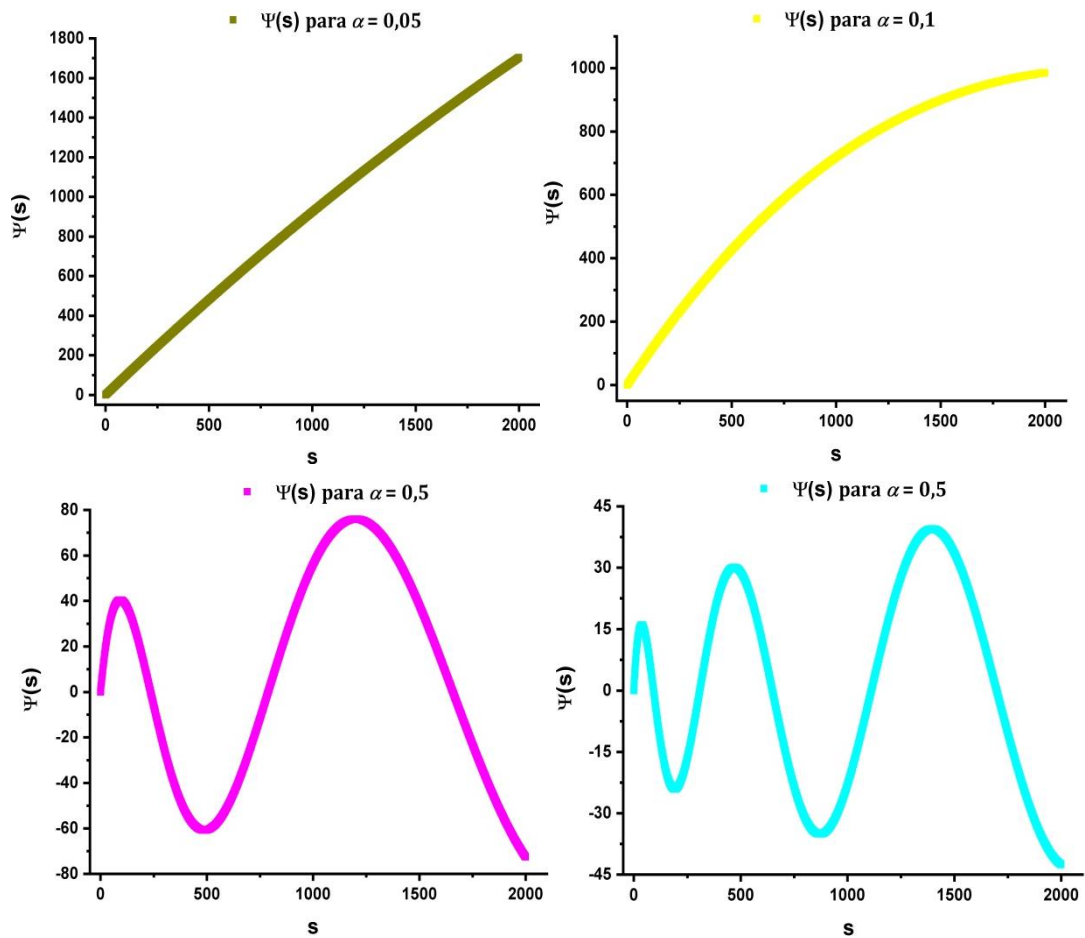
A EDO que modela o problema do confinamento no modo zero para esta curvatura é dada por:

$$\frac{d^2\Psi(s)}{ds^2} = -\frac{\alpha^2}{16s}\Psi(s) \quad (51)$$

Calculamos numericamente a resolução da equação 51, para os valores de α menores que 1 estudados, figura 16. Nas curvas com $\alpha = 0,05$ e $0,1$ as funções de onda não atendem a condição de contorno, o que indica a impossibilidade do confinamento da partícula. Porém, para as curvas espirais, $\alpha = 0,5$ e $0,8$, as funções de onda apresentam comportamentos senoidais, com maiores frequências em $\alpha = 0,8$.

Nota-se ainda, que as áreas das funções de onda são maiores nos valores de s mais elevados, o que indica que a partícula tende a se encontrar nas regiões com maiores curvaturas, ou seja, nas regiões mais afastadas dos polos das espirais.

Figura 16 – Gráficos de $\Psi(s)$ para $k(s) = \frac{\alpha}{2\sqrt{s}}$ com valores de α entre 0 e 1.

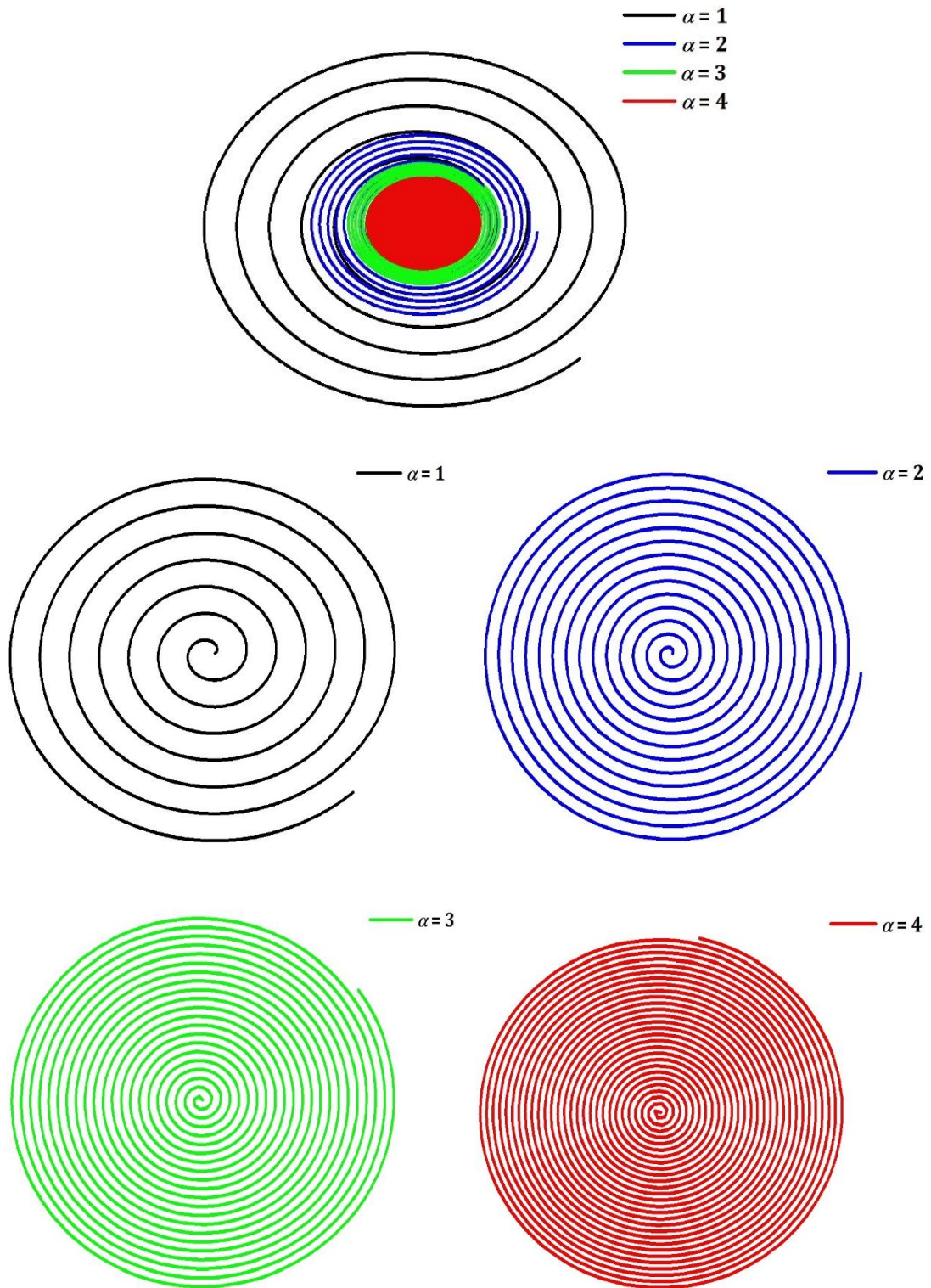


Fonte: Autoria própria.

Estudamos ainda os casos em que $\alpha = 1; 2; 3$ e 4 . As curvas encontradas, figura 17, também formam espirais de Arquimedes e, como esperado, com o aumento de α há um aumento nos valores da curvatura, fator que acelera a formação da espiral.

Nos casos em que $\alpha = 3$ e 4 , a curvatura assume valores muito maiores do que nos casos $\alpha = 1$ e 2 , isto faz com que $\alpha = 3$ e 4 se assemelhem a discos quando plotadas juntas às curvas com $\alpha = 1$ e 2 . Assim, para a melhor visualização, ainda na figura 17 temos as curvas encontradas plotadas separadamente.

Figura 17 – Curvas com $k(s) = \frac{\alpha}{2\sqrt{s}}$ para valores de α de 1 a 4.

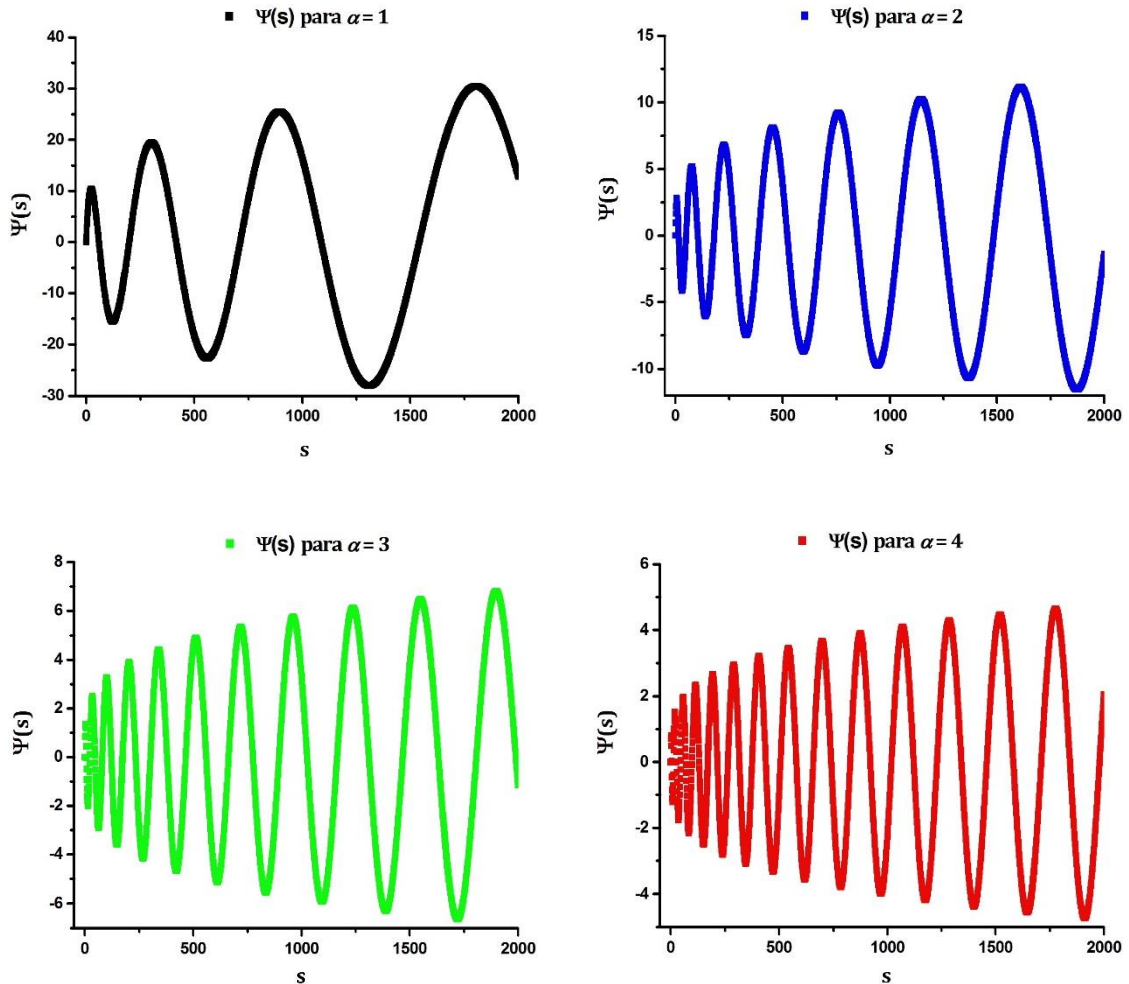


Fonte: Autoria Própria.

As funções $\Psi(s)$, obtidas numericamente para cada curva da figura 17, podem ser visualizadas na figura 18. Os comportamentos senoidais apresentados pelas funções de onda concordam com os resultados obtidos anteriormente para valores de α menores que 1, dado

que todas as curvas encontradas são espirais. Há ainda o aumento da frequência de acordo com o aumento de α .

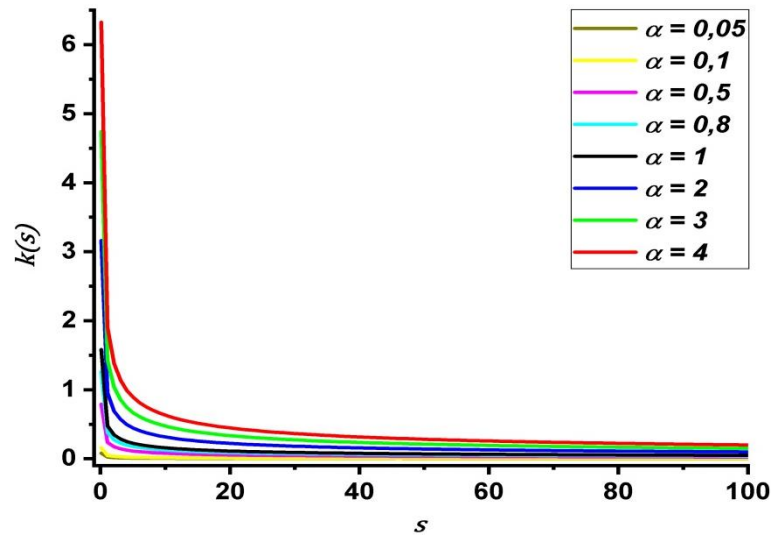
Figura 18 – Gráficos de $\Psi(s)$ para $k(s) = \frac{\alpha}{2\sqrt{s}}$ com valores de α entre 1 e 4.



Fonte: Autoria própria.

Além disso, os picos com maiores áreas estão presentes nas regiões com maiores valores de s . A figura 19 apresenta os gráficos da função curvatura para cada α estudado. Nestes, é possível analisar que os valores mais elevados de s resultam nas menores curvaturas das curvas. Com isso, os resultados indicam que estruturas químicas com a geometria espiral de Arquimedes tendem a sofrer ionização nas regiões mais afastadas do polo da espiral.

Figura 19 – Gráficos de $k(s) = \frac{\alpha}{2\sqrt{s}}$ para os valores de α estudados.



Fonte: Autoria própria.

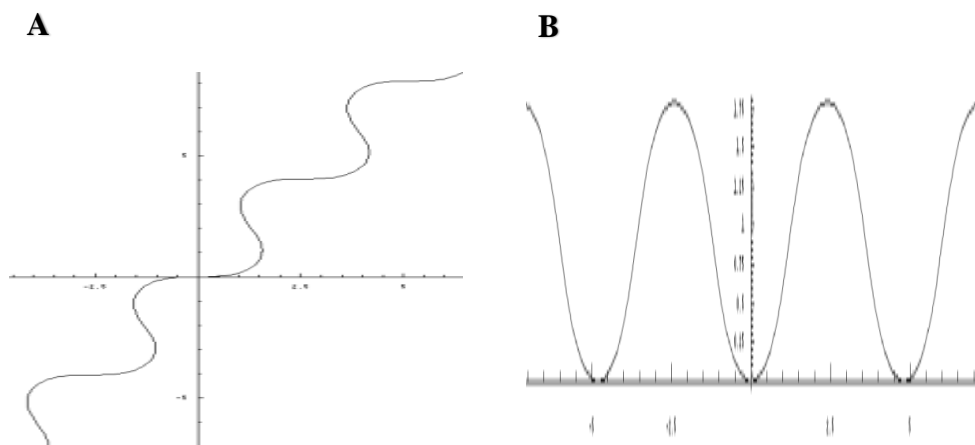
5.4 CURVATURA DE CURVAS DESCONHECIDAS

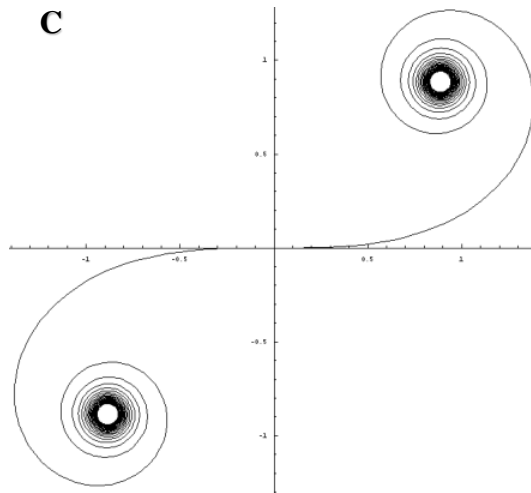
Nesta seção, discutiremos os resultados obtidos para o estudo da partícula no modo zero confinada em curvas que possuem curvaturas que impossibilitam a obtenção das soluções analíticas das integrais presentes na equação 12.

As curvaturas estudadas foram: $\sin^\alpha(s)$ e $\cos^\alpha(s)$, para $\alpha = 1; 2; 3$ e 4 , $\ln^\alpha(s)$ e s^α , para $\alpha = 1/2; 1; 3/2$ e 2 .

Contudo, encontramos na literatura as curvas, calculadas numericamente, para os casos em que $\alpha = 1$ nas curvaturas $\sin^\alpha(s)$, $\cos^\alpha(s)$ e s^α , figura 20 (PICADO, 2006).

Figura 20 – Curvas com curvaturas (A) $\sin(s)$, (B) $\cos(s)$ e (C) s , calculadas numericamente.





Fonte: Picado (2006).

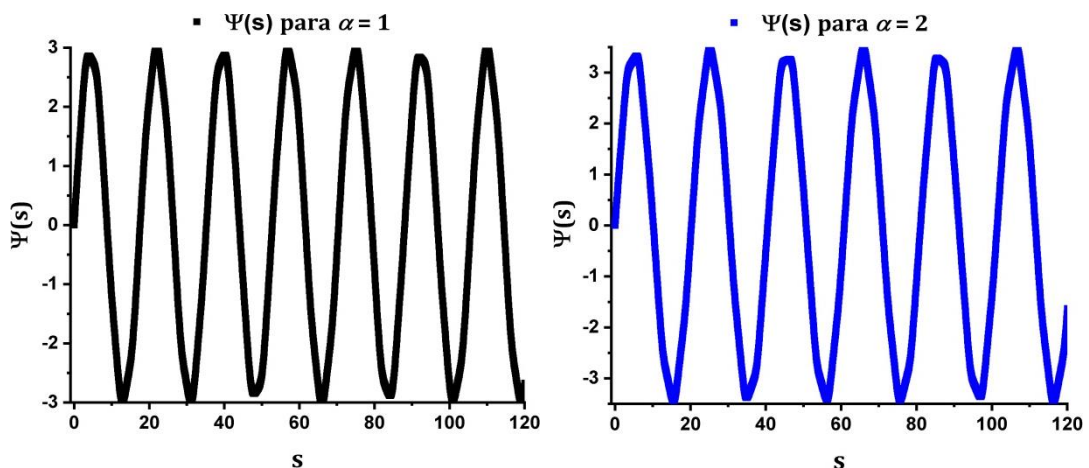
5.4.1 Partícula com energia zero confinada em uma curva com $k(s) = \cos^\alpha(s)$.

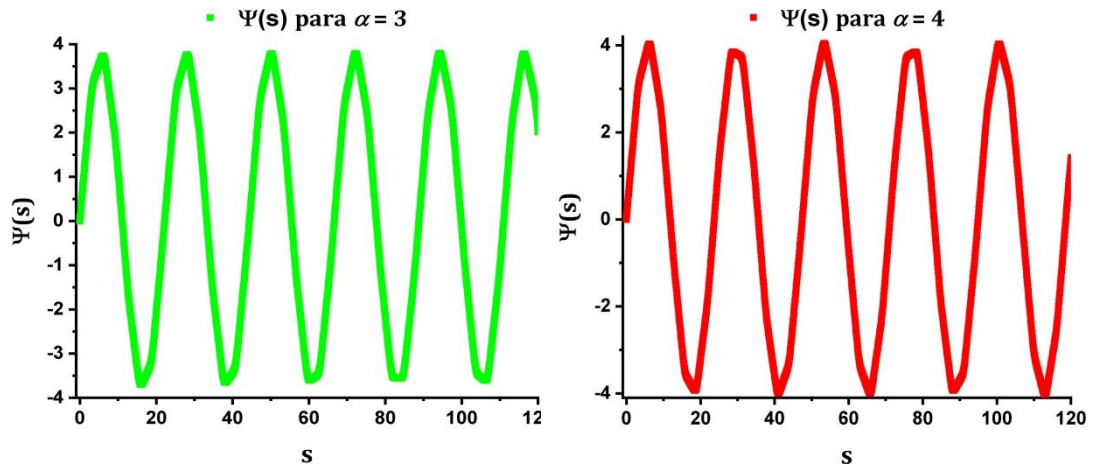
Considerando $k(s) = \cos^\alpha(s)$ na equação 41, temos que:

$$\frac{d^2\Psi(s)}{ds^2} = -\frac{\cos^{2\alpha}(s)}{4}\Psi(s) \quad (52)$$

A figura 21 apresenta os resultados numéricos obtidos para a equação 52, sendo $\alpha = 1$; 2; 3 e 4. As funções de onda apresentaram um comportamento senoidal, com diminuição da frequência e aumento de amplitude de acordo com o aumento de α . Porém para um mesmo α , não há mudanças significativas na área dos picos com a variação de s , indicando, como no caso do confinamento em circunferências (seção 4.2.2), que as regiões com maiores probabilidades de encontrar a partícula são equidistantes.

Figura 21 – Gráficos de $\Psi(s)$ para $k(s) = \cos^\alpha(s)$.





Fonte: Autoria própria.

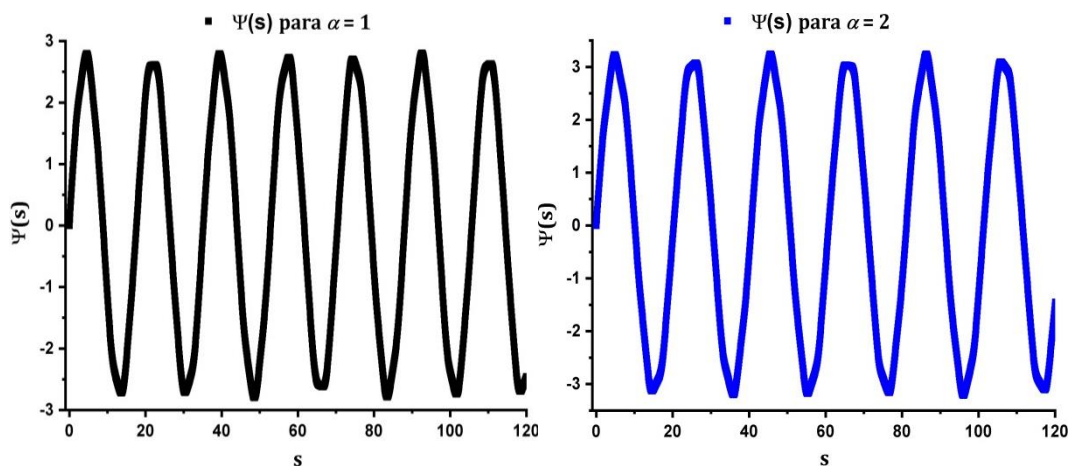
5.4.2 Partícula com energia zero confinada em uma curva com $k(s) = \text{sen}^\alpha(s)$.

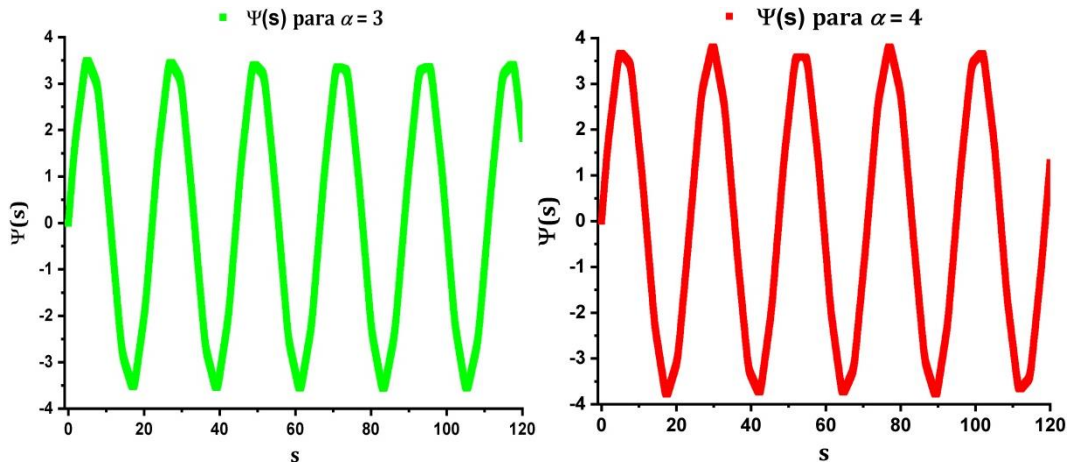
Para curvas com $k(s) = \text{sen}^\alpha(s)$, a EDO que modela o confinamento no modo zero se torna:

$$\frac{d^2\Psi(s)}{ds^2} = -\frac{\text{sen}^{2\alpha}(s)}{4}\Psi(s) \quad (53)$$

Consideramos $\alpha = 1; 2; 3$ e 4 para resolver a EDO utilizando o método RK4, figura 22. Os resultados obtidos para as $\Psi(s)$ encontradas demonstram um comportamento senoidal, com diminuição da frequência e aumento da amplitude onda de acordo com o aumento de α . A variação de s não causa mudanças significativas para os picos, em um dado α , o que indica uma densidade eletrônica distribuída igualmente em regiões equidistantes na curva.

Figura 22 – Gráficos de $\Psi(s)$ para $k(s) = \text{sen}^\alpha(s)$.





Fonte: Autoria própria.

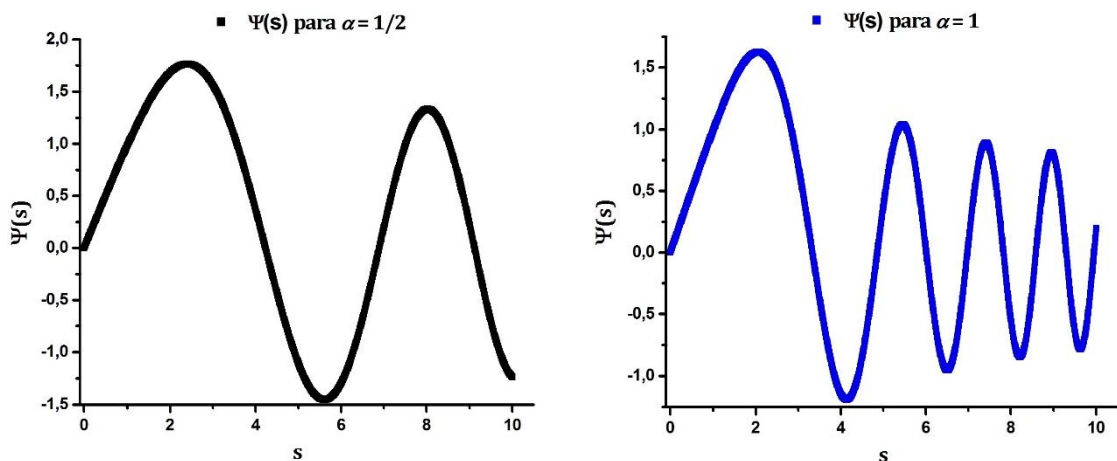
5.4.3 Partícula com energia zero confinada em uma curva com $k(s) = s^\alpha$.

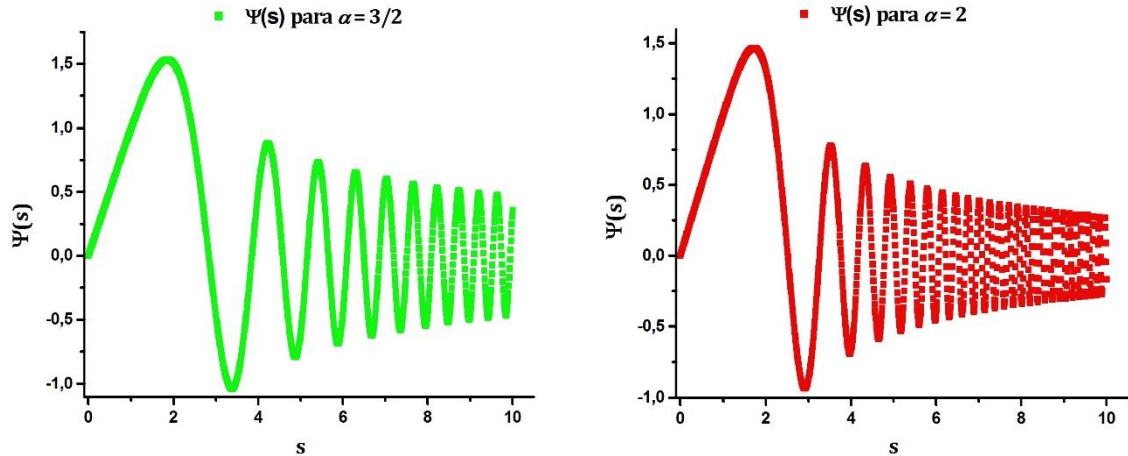
Considerando uma curva plana com $k(s) = s^\alpha$, tem-se a seguinte equação de Schrödinger no modo zero:

$$\frac{d^2\Psi(s)}{ds^2} = -\frac{s^{2\alpha}}{4}\Psi(s) \quad (54)$$

Calculamos numericamente a resolução da EDO com $\alpha = \frac{1}{2}$; 1; $\frac{3}{2}$ e 2, figura 23. As soluções apresentaram aumento da frequência e diminuição da amplitude de onda com o aumento de α . Para um mesmo valor de α , há uma diminuição da área dos picos da função de onda com o aumento de s .

Figura 23 – Gráficos de $\Psi(s)$ para $k(s) = s^\alpha$.

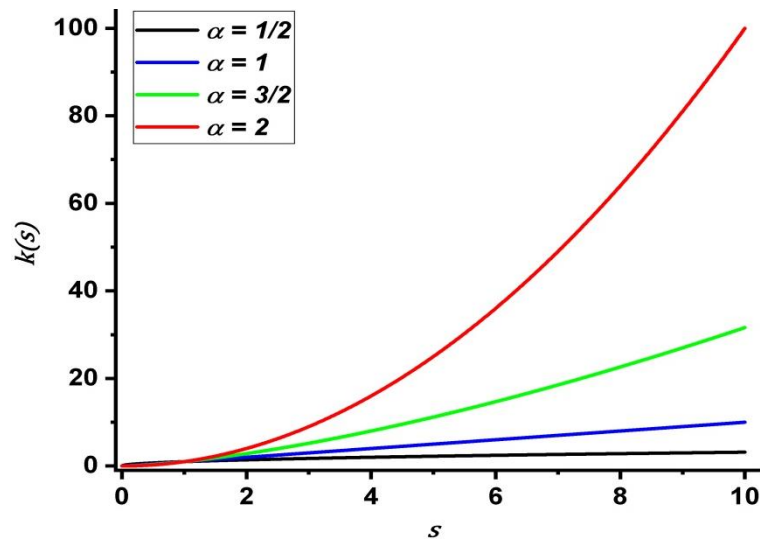




Fonte: Autoria própria.

A figura 24 apresenta os gráficos para as funções curvaturas estudadas. As região com menores valores de s fornecem os menores valores para $k(s)$. Assim, os resultados para $\Psi(s)$ evidenciam que os elétrons mais ionizáveis tendem a se encontrar nas regiões com menores curvaturas nas curvas estudadas.

Figura 24 – Gráficos de $k(s) = s^\alpha$ para os valores de α estudados.



Fonte: Autoria própria.

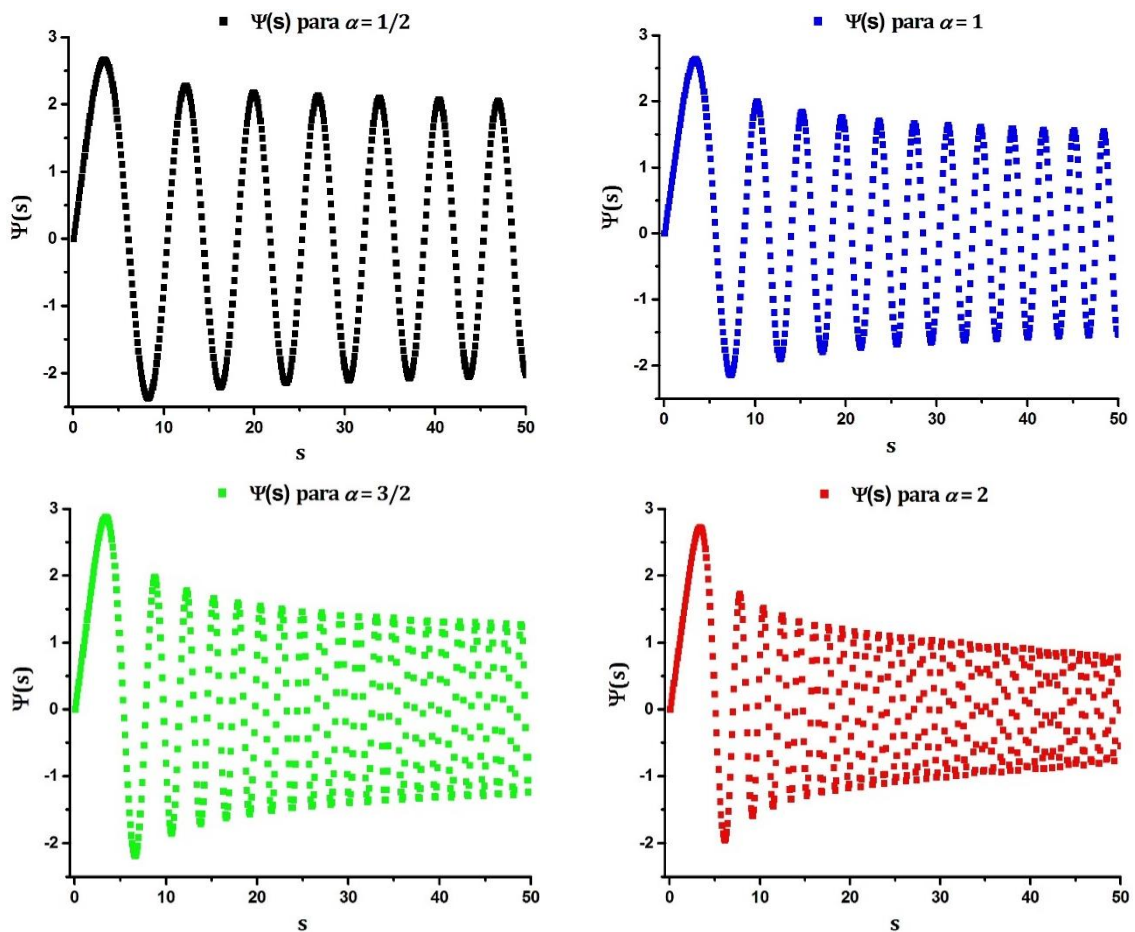
5.4.4 Partícula com energia zero confinada em uma curva com $k(s) = \ln^\alpha(s)$.

A EDO que modela o confinamento extrínseco de uma partícula no modo zero em curvas com $k(s) = \ln^\alpha(s)$ se apresenta como:

$$\frac{d^2\Psi(s)}{ds^2} = -\frac{\ln^{2\alpha}(s)}{4}\Psi(s) \quad (55)$$

As resoluções numéricas da equação 54, considerando $\alpha = \frac{1}{2}; 1; \frac{3}{2}$ e 2, são apresentadas na figura 25. As funções de onda apresentaram comportamento semelhante aos resultados obtidos na seção 4.4.3, com comportamentos senoidais, além do aumento da frequência e diminuição da amplitude de onda com o aumento dos valores de s .

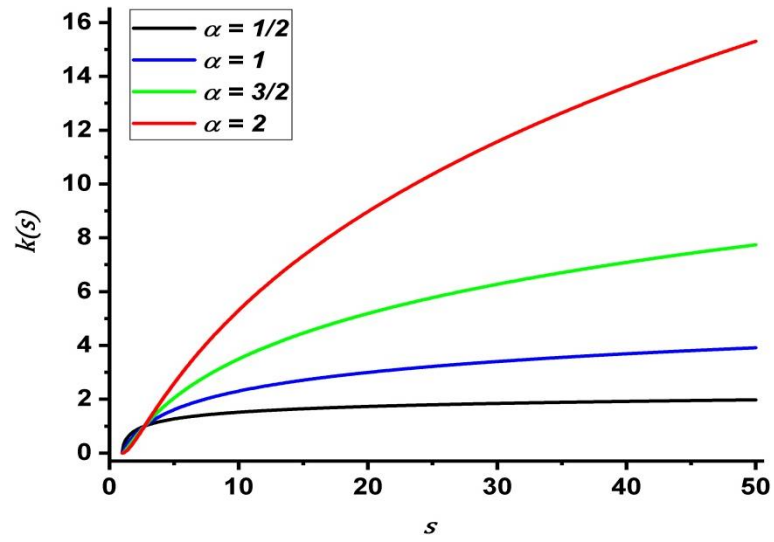
Figura 25 – Gráficos de $\Psi(s)$ para $k(s) = \ln^\alpha(s)$.



Fonte: Autoria própria.

A área dos picos nas $\Psi(s)$ diminui com o aumento de s . Analisando os gráficos das funções curvaturas estudadas, figura 26, nota-se que os menores valores de s resultam nos menores valores de curvatura.

Assim, moléculas e nanoestruturas com $k(s) = \ln^\alpha(s)$ tendem a ter seus elétrons mais facilmente ionizáveis nas regiões com menores curvaturas.

Figura 26 – Gráficos de $k(s) = \ln^\alpha(s)$ para os valores de α estudados.

Fonte: Autoria própria.

6 CONCLUSÃO

Foi possível resolver numericamente equações de Schrödinger no modo zero, que modelam o confinamento de partículas no limite de ligação em regiões unidimensionais, considerando a abordagem extrínseca dada por Da Costa.

As análises qualitativas das áreas dos picos das funções de onda permitiram identificar as regiões com maiores tendências de sofrerem ionização. Assim, o estudo de partículas confinadas em regiões unidimensionais pode fornecer uma aproximação das regiões mais facilmente ionizáveis nas moléculas e nanoestruturas com geometrias semelhantes às curvas estudadas. Contudo, serão necessários futuros cálculos computacionais para confirmação da hipótese.

Estruturas com geometrias próximas a uma reta, possivelmente tem seus elétrons ionizados com energias inferiores a 0. As estruturas circulares devem sofrer ionização em regiões equidistantes. Por outro lado, moléculas com geometrias semelhantes as espirais de Arquimedes e Logarítmica, tendem a ter os elétrons mais facilmente ionizáveis em regiões mais afastadas do polo da espiral.

Conseguimos ainda, partindo de algumas funções curvaturas, prever as regiões com maiores tendências de ionização em curvas ainda não definidas analiticamente.

Como perspectivas do trabalho, esperamos encontrar outras curvas com parametrizações por comprimento de arco e curvaturas conhecidas, que possibilitem a solução numérica da EDO que modela o confinamento extrínseco unidimensional no modo zero. Além disso, pretendemos calcular numericamente as integrais que fornecem as parametrizações das curvas que resolvemos numericamente o problema do confinamento a partir das suas curvaturas.

REFERÊNCIAS

- ANASTASSI, Z. A.; SIMOS, T. E. A Family of Exponentially-fitted Runge-Kutta Methods with Exponential Order Up to Three for the Numerical Solution of the Schrödinger Equation. **Journal of Mathematical Chemistry**, v. 41, p. 79-100, 2007.
- BASTOS, C. C.; PAIVA, G. S.; LEANDRO, E. S. G.; PAVÃO, A. C. An extension of the particle in a one dimensional box model. **Physics Education**, v. 28, n. 4, p. 3–6, 2012.
- CARMO, M. P. DO. **Differential Geometry of Curves and Surfaces**: Revised and updated. 2. ed. New York, USA: Prentice-Hall, 2016.
- CHAPRA, S. C.; CANALE, R. P. **Métodos Numéricos para Engenharia**. 7. ed. Porto Alegre: AMGH, 2016.
- DA COSTA, R. C. T. Quantum mechanics of a constrained particle. **Physical Review A**, v. 23, n. 4, p. 1982–1987, 1981.
- DABOUL, J.; NIETO, M.M; Quantum bound states with zero binding energy. **Physics Letters A**, v. 190, p. 357-362, 1994.
- FONTANA, E. **Eletromagnetismo - Parte 1** - Problemas de Valores de Fronteira em Eletrostática. 1. ed. Departamento de Eletrônica e Sistemas UFPE: 2011.
- FOX, R. W.; MCDONALD, A. T.; PRITCHARD, P. J; MITCHELL, J. W. **Introdução à mecânica dos fluidos**. 9. ed. LTC, 2018.
- FRANCO, N. B. **Cálculo Numérico**. 1. ed. São Paulo: Pearson Universidades, 2006.
- KOBAYASHI, T.; SHIMBORI, T. Zero-energy solutions and vortices in Schro'dinger equations. **Physical Review A**, v. 65, p 1-10, 2002.
- LIMA, E. L. **Álgebra Linear**. 1. ed. Rio de Janeiro: IMPA, 2014.
- LOCKWOOD, E. H. **A Book of Curves**. Cambridge: University Press, 1961.
- MAKOWSKI, A. J.; GÓRSKA, K. J. Unusual properties of some $E = 0$ localized states and the quantum-classical correspondence. **Physics Letters A**, v. 362, p. 26-30, 2007.
- NUSSENZVEIG, H. M. **Curso de Física Básica, 2: Fluidos, Oscilações e Ondas, Calor**. 2. ed. São Paulo: Blucher, 2014.
- NUSSENZVEIG, H. M. **Curso de Física Básica, 4: Ótica, Relatividade, Física Quântica**. 2. ed. São Paulo: Blucher, 2014.
- PADE, J. Exact solutions of the Schrödinger equation for zero energy. **The European Physical Journal D**, v. 53, p. 41-50, 2009.
- PICADO, J. **Apontamentos de Geometria Diferencial**. Universidade de Coimbra, 2006.

POLYANIN, A. D.; ZAITSEV, F. V. **Handbook of exacts solutions for ordinary differential equations**. 2. ed. Boca Raton, London, New York e Washington, D.C: Chapman & Hall/CRC, 2003.

SCHRÖDINGER, E. Quantisierung als Eigenwertproblem. **Annalen der Physik**, v. 384, n. 6, p. 489–527, 1926.

SILVA, L. C. da; BASTOS, C. C.; RIBEIRO, F. G. Quantum mechanics of a constrained particle and the problem of prescribed geometry-induced potential. **Annals of Physics**, v. 379, p. 13–33, 2017.

APÊNDICE A – ALGORITMO UTILIZADO PARA A COMPARAÇÃO DO RK4 COM UMA EDO DE PRIMEIRA ORDEM E OUTROS MÉTODOS NUMÉRICOS.

Alguns comentários, que auxiliam a compreensão do algoritmo abaixo, estão destacados em negrito.

```
function y = solucaoedoprimeiraordem (x)
```

```
    y = [1+exp(x^2/2)]^(-1)
```

```
endfunction //Definimos a solução analítica da EDO de primeira ordem estudada.
```

```
function z=g(x, y)
```

```
    z = x*y^2 - x*y;
```

```
endfunction //Definimos a EDO de primeira ordem que será solucionada numericamente,
```

onde $z = \frac{dy}{dx}$.

```
function [x, y] =euler (a, b, h, y0).
```

```
    x = a:h:b
```

```
    n = length(x)
```

```
    y(1) = y0
```

```
    for i = 1:n-1
```

```
        y(i+1) = y(i) + g(x(i),y(i))*h;
```

```
    end
```

```
endfunction
```

```
function [x, y]=heun(a, b, h, y0)
```

```
    x = a:h:b
```

```
    n = length(x)
```

```
    y(1) = y0
```

```
    for i = 1:n-1
```

```
        k1 = g(x(i),y(i))
```

```
        k2 = g(x(i)+h, y(i) + k1*h)
```

```
        k = 0.5*(k1+k2)
```

```
        y(i+1) = y(i) + k*h;
```

```

end
endfunction

```

```

function [x, y]=PontoMedio(a, b, h, y0)
    x = a:h:b
    n = length(x)
    y(1) = y0
    for i = 1:n-1
        k1 = g(x(i),y(i))
        k2 = g(x(i)+h/2, y(i) + k1*h/2)
        y(i+1) = y(i) + k2*h;
    end
endfunction

```

```

function [x, y]=RK4(a, b, h, y0)
    x = a:h:b
    n = length(x)
    y(1) = y0
    for i = 1:n-1
        k1 = g(x(i),y(i))
        k2 = g(x(i)+h/2, y(i) + k1*h/2)
        k3 = g(x(i)+h/2, y(i)+k2*h/2)
        k4 = g(x(i)+h, y(i)+k3*h)
        k = (k1+2*k2+2*k3+k4)/6
        y(i+1) = y(i) + k*h;
    end
endfunction

```

//Programamos as rotinas dos métodos numéricos utilizados para a resolução da EDO de primeira ordem estudada: Euler, Heun, ponto médio e RK4.

```

[x,ye] = euler(-3.9,3.9,.1, 0.0004977)
[x,yh] = heun(-3.9,3.9,.1, 0.0004977)
[x,ypm] = PontoMedio(-3.9,3.9,.1, 0.0004977)

```

`[x,yrk4] = RK4(-3.9,3.9,.1, 0.0004977)` //Fornecemos ao programa os parâmetros numéricos utilizados para o cálculo da solução numérica da EDO de primeira ordem estudada.

`plot(x',ye,'o')`

`plot(x',yh,'x')`

`plot(x',ypm,'+')`

`plot(x',yrk4,'^')` //Damos o comando para o plot dos gráficos numericamente obtidos.

`a = -3.9:.01:3.9`

`y = solucaoedoprimeiraordem (a)`

`plot (a,y,'-')` //Damos o comando para o plot da solução analítica e os parâmetros para a extensão do gráfico.

**APÊNDICE B – ALGORITMO UTILIZADO PARA A COMPARAÇÃO DO RK4
COM UMA EDO DE SEGUNDA ORDEM E OUTROS MÉTODOS NUMÉRICOS.**

```
function y = solucaoedosegundaordem(x)
```

```
    y = exp(x)+2*exp(x/2)
```

```
endfunction //Definimos a solução analítica da EDO de primeira ordem estudada.
```

```
function t=gy(x, y, z)
```

```
    t = z;
```

```
endfunction //Definimos, como uma função, uma das equações do sistema de EDOs de  
primeira ordem, obtido pela EDO de segunda ordem, onde  $z = \frac{dy}{dx}$ .
```

```
function s=gz(x, y, z)
```

```
    s = (3*z-y)/2;
```

```
endfunction //Definimos, como uma função, uma das equações do sistema de EDOs de  
primeira ordem, obtido pela EDO de segunda ordem, onde  $s = \frac{dz}{dx}$ .
```

```
function [x, y, z]=eulersistema(a, b, h, y0, z0)
```

```
    x = a:h:b
```

```
    n = length(x)
```

```
    y(1) = y0
```

```
    z(1) = z0
```

```
    for i = 1:n-1
```

```
        k1s = gy(x(i),y(i),z(i))
```

```
        k1v = gz(x(i),y(i),z(i))
```

```
        y(i+1) = y(i) + k1s*h;
```

```
        z(i+1) = z(i) + k1v*h;
```

```
    end
```

```
endfunction
```

```
function [x, y, z]=heunSistema(a, b, h, y0, z0)
```

```
    x = a:h:b
```

```
    n = length(x)
```

```

y(1) = y0
z(1) = z0
for i = 1:n-1
    k1s = gy(x(i),y(i),z(i))
    k1v = gz(x(i),y(i),z(i))
    k2s = gy(x(i)+h, y(i) + k1s*h, z(i) + k1v*h)
    k2v = gz(x(i)+h, y(i) + k1s*h, z(i) + k1v*h)
    y(i+1) = y(i) + (k1s+k2s)*h/2;
    z(i+1) = z(i) + (k1v+k2v)*h/2;
end
endfunction

```

```

function [x, y, z]=pontoMedioSistema(a, b, h, y0, z0)

```

```

    x = a:h:b
    n = length(x)
    y(1) = y0
    z(1) = z0
    for i = 1:n-1
        k1s = gy(x(i),y(i),z(i))
        k1v = gz(x(i),y(i),z(i))
        k2s = gy(x(i)+h/2, y(i) + k1s*h/2, z(i) + k1v*h/2)
        k2v = gz(x(i)+h/2, y(i) + k1s*h/2, z(i) + k1v*h/2)
        y(i+1) = y(i) + k2s*h;
        z(i+1) = z(i) + k2v*h;
    end
endfunction

```

```

function [x, y, z]=rk4Sistema(a, b, h, y0, z0)

```

```

    x = a:h:b
    n = length(x)
    y(1) = y0
    z(1) = z0
    for i = 1:n-1
        k1s = gy(x(i),y(i),z(i))

```

```

k1v = gz(x(i),y(i),z(i))
k2s = gy(x(i)+h/2, y(i) + k1s*h/2, z(i) + k1v*h/2)
k2v = gz(x(i)+h/2, y(i) + k1s*h/2, z(i) + k1v*h/2)
k3s = gy(x(i)+h/2, y(i) + k2s*h/2, z(i) + k2v*h/2)
k3v = gz(x(i)+h/2, y(i) + k2s*h/2, z(i) + k2v*h/2)
k4s = gy(x(i)+h, y(i) + k1s*h, z(i) + k3v*h)
k4v = gz(x(i)+h, y(i) + k1s*h, z(i) + k3v*h)
y(i+1) = y(i) + (k1s+2*k2s+2*k3s+k4s)*h/6;
z(i+1) = z(i) + (k1v+2*k2v+2*k3v+k4v)*h/6;

```

```
end
```

endfunction //Programamos as rotinas dos métodos numéricos utilizados para a resolução da EDO de segunda ordem estudada: Euler, Heun, ponto médio e RK4.

```
[x,ye,ze] = eulersistema(0,4,0.2,3,2)
```

```
[x,yh,zh] = heunSistema(0,4,0.2,3,2)
```

```
[x,ypm,zpm] = pontoMedioSistema(0,4,0.2,3,2)
```

```
[x,yrk4,zrk4] = rk4Sistema(0,4,0.2,3,2) //Fornecemos ao programa os parâmetros numéricos utilizados para o cálculo da solução numérica da EDO de primeira ordem estudada.
```

```
plot(x,ye,'+')
```

```
plot(x,yh,'x')
```

```
plot(x,ypm,'o')
```

```
plot(x,yrk4,'^') //Damos o comando para o plot dos gráficos numericamente obtidos.
```

```
a = 0:.02:4
```

```
y = solucaoedosegundaordem (a)
```

```
plot (a,y,'-') //Damos o comando para o plot da solução analítica e os parâmetros para a extensão do gráfico.
```

**APÊNDICE C – ALGORITMO UTILIZADO PARA A RESOLUÇÃO DA EQUAÇÃO
DE SCHRÖDINGER NO MODO ZERO UTILIZANDO O RK4.**

function w=g \underline{y} (x, y, z)

$$w = z$$

endfunction //Definimos, como uma função, uma das equações do sistema de EDOs de primeira ordem, obtido pela EDO de segunda ordem, onde $z = \frac{dy}{dx}$.

function t=g \underline{z} (x, y, z)

$$t = - (k(s))^2/4*y$$

endfunction //Definimos, como uma função, uma das equações do sistema de EDOs de primeira ordem, obtido pela EDO de segunda ordem, onde $t = \frac{dz}{dx}$. Devemos substituir **k(s)** pela função curvatura desejada.

function [x, y, z]=rk4daCostamodozero(a, b, h, y0, z0)

$$x = a:h:b$$

$$n = \text{length}(x)$$

$$y(1) = y0$$

$$z(1) = z0$$

for i = 1:n-1

$$k1y = g\mathbf{y}(x(i),y(i),z(i))$$

$$k1z = g\mathbf{z}(x(i),y(i),z(i))$$

$$k2y = g\mathbf{y}(x(i) + h/2, y(i) + k1y*h/2, z(i) + k1z*h/2)$$

$$k2z = g\mathbf{z}(x(i) + h/2, y(i) + k1y*h/2, z(i) + k1z*h/2)$$

$$k3y = g\mathbf{y}(x(i) + h/2, y(i) + k2y*h/2, z(i) + k2z*h/2)$$

$$k3z = g\mathbf{z}(x(i) + h/2, y(i) + k2y*h/2, z(i) + k2z*h/2)$$

$$k4y = g\mathbf{y}(x(i) + h, y(i) + k3y*h, z(i) + k3z*h)$$

$$k4z = g\mathbf{z}(x(i) + h, y(i) + k3y*h, z(i) + k3z*h)$$

$$ky = (k1y + 2*k2y + 2*k3y + k4y)/6$$

$$kz = (k1z + 2*k2z + 2*k3z + k4z)/6$$

$$y(i+1) = y(i) + ky*h$$

$$z(i+1) = z(i) + kz*h$$

end

endfunction //Programamos as rotinas do RK4 utilizado para a resolução da EDO de segunda ordem estudada.

$[x,y,z] = \text{rk4daCostamodozero}(s_{inicial}, s_{final}, h, \Psi(s_{inicial}), \frac{d\Psi(s_{inicial})}{ds})$ //Fornecemos ao programa os parâmetros numéricos utilizados para o cálculo da solução numérica da EDO de primeira ordem estudada. Devemos substituir os parâmetros numéricos, expressos aqui de maneira geral, pelos valores utilizados no estudo de uma determinada curvatura.

plot(x',y,'o') //Damos o comando para o plot dos gráficos numericamente obtidos.