II CONAPESC
II CONGRESSO NACIONAL DE PESQUISA E ENSINO EM CIÊNCIAS
TEMA FORMAÇÃO PARA O ENSINO E A PESQUISA EM CIÊNCIAS: SABERES MULTIDISCIPLINARES

SOLUÇÕES PARA EQUAÇÃO DE SCHRODINGER INDEPENDENTE DO TEMPO E O ENSINO DE FÍSICA

Jerssie Rodrigues de Sousa[1] ; Augusto Moreira[1]
Universidade Federal de Pernambuco, jerssie.sousa@ufpe.br ; aclm@df.ufpe.br

Introdução

Há duas formulações para a mecânica quântica, a saber, a equação de Schrödinger - que nada mais é do que uma equação diferencial de segunda ordem - e a formulação matricial desenvolvida por Heisenberg.

Erwin Schrödinger, físico teórico austríaco, publicou sua famosa equação de onda no início do século que revolucionou a mecânica quântica dando uma explicação sobre o modo como de Broglie tratava a propagação de ondas de matéria. Esta equação de onda é análoga à equação de difusão na mecânica clássica. Alguns meses antes, Werner Heisenberg tinha apresentado uma teoria que aparentava ser distinta. Aplicando grandezas dinâmicas, como energia, posição e momento, todas representadas por matrizes, os elementos diagonais dessas matrizes representavam os resultados possíveis das medidas. Embora as teorias de Schrödinger e Heisenberg num primeiro momento pareçam distintas mostrou-se que elas são equivalentes.

Apesar de ambas as formulações serem tidas como equivalentes, a passagem de uma formulação para outra é pouco discutida em alguns livros didáticos. Aqui neste trabalho em andamento, buscamos na literatura um exemplo simples que pode ser desenvolvido por ambos os métodos e, conseqüentemente, compará-los. Este exemplo envolve um oscilador harmônico quântico simples, unidimensional, na presença de um campo elétrico externo. Tal sistema pode facilmente ser resolvido tanto na formulação diferencial quanto na matricial e apresentar as semelhanças e diferenças entre os dois métodos.

Metodologia

Como já mencionado, a equação de onda é muito abrangente no estudo da mecânica quântica sendo aplicado a diversos modelos teóricos. Neste trabalho resolveremos um oscilador harmônico quântico unidimensional, escolhido pela sua relevância visto que quaisquer sistemas que oscile em volta de um ponto de equilíbrio estável pode ser descrito, aproximadamente, por um oscilador harmônico simples, tendo assim uma ampla compatibilidade com diversos fenômenos físicos.

Introduzimos na equação de Schrödinger um termo proporcional a posição representando um campo elétrico externo. Assim, por meios analíticos (re-nomeando variáveis) através da equação de Schrödinger, podemos adquirir tanto os dez primeiros valores de energia, de forma exata quanto as autofunções exatas da equação diferencial correspondente. Em seguida, definindo-se uma base contendo n elementos e, através de operadores de criação e destruição, obtivemos uma matriz quadrada de dimensão n com a qual calculamos os autovalores e autovetores. Aplicando o método para diferentes valores (crescentes) de dimensões - variando entre *n=2* à *n=10* , com o auxílio de um software para cálculos numéricos gratuito disponível online (GNU Octave) pode-se calcular de maneira fácil os autovalores associados a cada uma das nove matrizes. Desta maneira, podemos encontrar os valores dos níveis de energia de cada matriz quadrática, começando com os dois primeiros valores de energia para uma matriz 2x2, acrescentando sempre mais um nível de energia a cada dimensão totalizando dez níveis de energia na última matriz com dimensão 10x10.

Resultados e discussão

Conforme os objetivos da proposta, após a obtenção dos resultados adquiridos, os dados geraram um gráfico dos níveis de energia em função da quantidade de elementos na base (ou da dimensão da matriz). Em seguida, no mesmo gráfico, acrescentamos os pontos adquiridos a partir d a solução exata obtidos com a resolução da equação diferencial.

Ao comparar o resultado da solução exata com os autovalores das matrizes de dimensão *n*, para *n = 2*, os dois níveis de energia obtidos pela formulação matricial possuíam erros consideráveis quando comparados com a solução exata. Contudo, na medida em que a dimensão da matriz (*n*) aumenta os primeiros autovalores obtidos através da formulação matricial vão, pouco a pouco, convergindo para o resultado analítico exato. Analisando os dados resultantes da matriz com *n = 4*, encontramos uma precisão menor que milésimos no nível de energia inicial e no segundo e terceiro níveis a imprecisão está em centésimos e décimos, respectivamente. Em suma, é possível observar na comparação entre cada resultado obtido um desvio entre os dois últimos níveis de energia dos resultados matriciais para diferentes dimensões quando comparados aos resultados dos valores energéticos do método analítico exato, gerando uma imprecisão dos resultados matriciais fazendo com que o método seja inexato em seus níveis de energia.

É necessário encontrar os autovalores de uma matriz 9x9 para que os primeiros autovalores convirjam para o resultado do autovalor está idêntico ao exato. Tal resultado está comentado no livro Mecânica Quântica Básica: *"Para que essa aproximação seja boa, a dimensão N não pode ser muito pequena. Na prática, se queremos calcular os primeiros m níveis de energia, devemos ir aumentando o valor de N até que o valor do m-ésimo nível fique praticamente independente de N. A partir desse ponto, temos uma aproximação confiável.*"(NOVAES, 2016). Este é exatamente o ponto observado após a visualização dos resultados.

Conclusões

A maneira que é comentada tal situação em alguns livros passa a ser desconexa sem uma análise quando se trata da análise do formato matricial ou idêntica, no caso do Eisberg a teoria proposta por Heisenberg é brevemente comentada sem uma discussão aprofundada ou alguma conexão ao método diferencial, enquanto o livro de Caruso traz um capítulo tratando da mecânica de Heisenberg colocando em sua introdução que tanto a solução de um problema através da mecânica matricial quanto a na sua formulação diferencial acarretam, impreterivelmente, nos mesmos resultados (autovalores). Contudo a partir dessa comparação, o trabalho apresenta que essa igualdade é inverossímil quando se trata de matrizes de pequenas dimensões, condição esta comentada no livro de Novaes, verificando que os resultados podem ser compatíveis apenas quando se leva em consideração os primeiros autovalores de matrizes de dimensões elevadas havendo sempre uma imprecisão considerável nos últimos níveis energéticos quando comparados com a solução exata na forma diferencial.

Palavras-Chave: Mecânica Quântica; Oscilador Harmônico; Física Moderna.

Fomento

Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC) oferecido pelo Conselho Nacional de Pesquisas (CNPq), 2016/2017.

Referências

TIPLER, Paul A; LLEWELLYN, Ralph A. **Física Moderna**. 6º Edição. Rio de Janeiro: LTC, 2014.

NOVAES, Marcel; STUDART, Nelson. **Mecânica Quântica Básica**. 1º Edição. São Paulo: Editora Livraria Da Física, 2016.

EISBERG, Robert; RESNICK, Robert. **Física Quântica**. 28º Tiragem. Rio de Janeiro: Editora Elsevier, 1979.