

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

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 reflitam 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: Método de diferenças finitas; Equação de Schrödinger; Potenciais canônicos.

