



Poço de potencial finito como átomos hidrogenóides

Hudson R. Armando,* Kaue H. Abbehausen, Caio S. Costa, Leonardo S. Barbosa, and David L. Azevedo
Instituto de Física, Universidade de Brasília.

(Dated: November 27, 2023)

Neste artigo, resolvemos numericamente a equação de Schrödinger para um elétron sujeito a potencial caixa unidimensional de profundidade finita. Aplicamos este modelo amplamente explorado em física, aos átomos H, Li, Na e K da família 1A da tabela periódica, cujos elétrons na camada de valência possuem momento angular orbital $l = 0$. A fim de obter uma estimativa da profundidade de um potencial caixa finito que melhor represente cada átomo. Determinamos qual profundidade de caixa e largura (diâmetro atômico) reproduz as auto-energias do estado fundamental obtidas através do método *ab-initio* Hartree-Fock com uma base aug-cc-pVQZ. Além disso, variamos a profundidade V_0 no intervalo (-0.9 a -0.108 Ha em *steps* de 0.008) e largura L no intervalo (1.9 a 8.83 Bohr em *steps* de 0.07) de potenciais caixas (totalizando 10 mil soluções numéricas para obtenção das auto-energias) e a partir destes resultados, propusemos uma função de ajuste da forma: $E(V, L) = a \cdot \ln(-VL) + b \cdot L \sqrt[3]{V} + c$, função da profundidade da caixa V_0 e da largura da caixa L (diâmetro atômico dos elementos) que apresentou um acordo excelente de $R^2 \simeq 0.992$. Desta forma, pudemos com uma aproximação de tão simples como equação de Schrödinger para apenas um elétron confinado num potencial unidimensional reproduzir o resultado do problema de muitos corpos como um átomo hidrogenóide.

Palavras-chave: Equação de Schrödinger unidimensional, potencial caixa unidimensional, energias do estado fundamental de átomos, Hartree-Fock, diferenças finitas, Python

I. INTRODUÇÃO: CONTEXTO HISTÓRICO

No início do século XX foi possível verificar por meio de experimentos que as partículas atômicas possuem uma natureza ondulatória, ou seja, suas leis de movimento são as mesmas usadas para descrever a propagação de ondas [1]. Dessa forma, hoje sabe-se que, por exemplo, os elétrons exibem padrões de difração ao passar por uma fenda dupla, comportamento análogo ao verificado nas ondas de luz. Portanto, era bastante plausível supor que o comportamento das partículas atômicas poderia ser matematicamente representado por uma entidade matemática chamada função de onda [2], um conceito que demandou a contribuição de muitos físicos até culminar em sua atual interpretação, que envolve a ideia de densidade de probabilidade.

Na mecânica quântica, a função de onda $\psi(x, t)$ corresponde a forma mais completa de descrever um sistema físico. Isso foi demonstrado pelo físico austríaco Erwin Schrödinger [3] que, em 1926, publicou um estudo onde aparece pela primeira vez a sua famosa equação diferencial parcial que usa a função de onda para modelar o es-

tado quântico de um sistema físico evoluindo no tempo. Vale enfatizar que a função de onda, por si só, é uma representação abstrata do estado do sistema, sem significado fora do contexto da mecânica quântica. Além disso, por ser uma quantidade complexa, sua medida direta por meio de um instrumento físico é impossível [4].

Essencialmente, a equação de Schrödinger pode ser formulada de duas maneiras distintas: uma que é dependente do tempo e outra que é independente do tempo [5]. De forma geral, podemos expressá-la da seguinte maneira:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x, t)}{dx^2} + U(x, t)\psi = E\psi(x, t) \quad (1)$$

E quando não houver dependência temporal, basta fazer $t = 0$ na equação (1). A solução da equação (1) por métodos analíticos depende do potencial $U(x, t)$ escolhido e das condições de contorno impostas à equação. Por conta dessa restrição, é comum haver uma maior preferência pelas abordagens numéricas disponíveis na literatura. As soluções da equação de Schrödinger são capazes de descrever sistemas moleculares, atômicos, subatômicos e alguns sistemas macroscópicos [6].

No que diz respeito à abordagem analítica para resolver a equação de Schrödinger, encontra-se na literatura vários pesquisadores renomados que contribuíram

* Also at Instituto de Física, Universidade de Brasília.

de forma significativa à física ao lidar com o problema. Podemos citar o próprio Erwin Schrödinger como o primeiro a desenvolver uma solução analítica, utilizando para isso técnicas matemáticas avançadas, como a superposição de ondas e a separação de variáveis [5]. No ano de 1928, o físico britânico Paul Dirac divulgou o primeiro de uma sequência de estudos que visavam combinar a teoria quântica com a teoria da relatividade de Einstein. Nesses trabalhos, ele apresentou uma explicação relativística para a propriedade do spin do elétron utilizando métodos analíticos, como a álgebra de operadores, para resolver a equação de Schrödinger relativística e descrever o comportamento de partículas subatômicas de altas energias [7].

Em 1948 Richard Feynman publicou a sua abordagem inovadora para resolver a equação de Schrödinger, uma técnica que hoje é conhecida como *Integrais de Caminho*. Sua proposta consiste em admitir que as partículas seguem todas as trajetórias possíveis simultaneamente, de tal forma que cada trajetória possui um fator de amplitude relacionado capaz de interferir com as outras trajetórias. Essa abordagem permitiu calcular probabilidades de transição entre diferentes estados quânticos [8].

Em 1953 Max Born apresentou a sua interpretação probabilística da solução da equação de Schrödinger, também conhecida como *função de onda*. A sua ideia parte do princípio básico de densidade de probabilidade $\rho(x, t)$, que descreve a probabilidade de encontrar uma partícula em uma determinada posição x e num instante t [9]. Assim, de acordo com Born, a probabilidade de se encontrar uma partícula num intervalo $x + dx$ é dada pelo quadrado da amplitude da função de onda, ou seja:

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2. \quad (2)$$

Então, levando-se em consideração todo o espaço, teremos:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (3)$$

Diversos pesquisadores adotaram diferentes metodologias analíticas para solucionar a equação de Schrödinger, cada uma contribuindo significativamente para a compreensão da mecânica quântica e a descrição de sistemas físicos quânticos. Um exemplo recente é o trabalho de Makowski (1991), no qual ele apresentou soluções exatas para três variações de um poço infinitamente profundo com limites móveis. Além disso, Makowski propôs e solucionou com precisão uma modificação especial do modelo clássico do acelerador de Fermi, adaptando-o para o contexto quântico [10].

Apesar dos avanços das abordagens analíticas, os métodos numéricos tiveram um papel crucial na solução da equação de Schrödinger, especialmente devido ao rápido crescimento do poder de processamento dos computadores presenciado nas últimas décadas.

Em 1969, Doscher e Rice investigaram o problema de uma partícula em um poço de potencial quadrado infinito unidimensional com paredes que se movem a uma

velocidade constante. Para abordar essa questão, eles empregaram um método que consistia em comparar um conjunto completo de funções, que são soluções exatas da equação de Schrödinger dependente do tempo, com um tratamento de perturbação de primeira ordem. O estudo incluiu resultados numéricos para uma partícula inicialmente no estado fundamental [11]. Hawk e Hardcastle publicaram em 1976 os resultados de um estudo em que descrevem a equação de Schrödinger para os estados do orbital s do átomo de hélio [12]. Para resolver esse problema, os pesquisadores converteram a equação diferencial elíptica encontrada em um conjunto de equações de diferenças finitas, alcançando a solução por meio de uma técnica iterativa.

Em 1989, Marston e Balint-Kurti propuseram um método inovador para calcular autovalores e autofunções da equação de Schrödinger. Eles desenvolveram uma abordagem baseada no algoritmo da transformada discreta de Fourier e aplicaram-na ao método hamiltoniano da grade de Fourier. Essa abordagem permitiu obter as autofunções diretamente em pontos específicos da grade, exigindo apenas a avaliação do potencial nesses pontos [13]. Em 2000, Aronstein e Stroud propuseram uma solução em série para os níveis de energia de um potencial quadrado finito unidimensional na mecânica quântica. Essa solução é útil para aproximações locais e globais do espectro de energia, além de permitir uma descrição analítica de fenômenos dinâmicos, como o cálculo das escalas de tempo para o movimento clássico e *revivals* de estados excitados no potencial [14]. Em 2004, Strikwerda publicou uma solução numérica da equação de Schrödinger usando o método de diferenças finitas [15].

Anders W. Sandvik publicou um artigo em 2013 [16] onde apresentou uma solução numérica da equação de Schrödinger utilizando um método multipasso linear de quarta ordem conhecido como método de Numerov. Também usando o algoritmo de Numerov, Danny Bennett resolveu (em 2015) a equação de Schrödinger para diferentes potenciais, incluindo o poço quadrado, o harmônico e o linear. Nesse estudo, as funções de onda foram integradas com o algoritmo Numerov usando uma energia inicial de teste. Em seguida, desenvolveu-se uma função para determinar os autoestados do potencial, permitindo obter soluções numéricas sem a necessidade de conhecer as soluções analíticas [17].

A partir dessa breve exposição histórica, na qual destacamos alguns progressos notáveis alcançados por meio do estudo da equação de Schrödinger, observamos que uma solução analítica é inviável na maioria dos casos, enquanto que os métodos numéricos se mostram como importantes aliados para a obtenção de soluções aproximadas satisfatórias. Esses métodos são essenciais para obter resultados quantitativos, estudar sistemas complexos, validar teorias e avançar na compreensão da física quântica. Eles desempenham um papel fundamental na pesquisa e no progresso do conhecimento nessa área.

Neste artigo, propomos utilizar o método numérico de diferenças finitas para resolver a equação de Schrödinger

em uma caixa de potencial unidimensional. Aplicaremos esse método aos elementos da família 1A da tabela periódica, cujos elétrons na camada de valência possuem momento angular orbital $l = 0$. Essa característica resulta em soluções da equação de Schrödinger que correspondem a funções radiais com orbitais esféricos. Nesse cenário de confinamento unidimensional, a profundidade da caixa é associada ao potencial V_0 , enquanto a largura L representa o diâmetro do átomo.

O objetivo é estimar valores aproximados das profundidades de potencial e calcular as energias que resultem em valores muito próximos das energias do estado fundamental para os elementos H, Li, Na e K, levando em consideração seus respectivos diâmetros atômicos (representados pela largura L).

Com base nos dados coletados, pode-se ajustá-los para encontrar uma função matemática que melhor se adapte aos pontos experimentais. O objetivo é estabelecer uma relação entre as autoenergias E da equação de Schrödinger, a largura L , e a profundidade da caixa de potencial V_0 . Essa função irá representar, de forma aproximada, o comportamento dos dados e permitir previsões para valores não observados.

A vantagem adicional dessa abordagem é que a função aproximada encontrada não possui a complexidade inerente das soluções analíticas. Por fim, vale ressaltar que, na análise realizada neste trabalho, excluímos os elementos Rb, Cs e Fr, uma vez que requerem correções relativísticas no cálculo das auto-energias.

II. SOLUÇÃO ANALÍTICA

A equação de Schrödinger unidimensional para uma partícula de massa m com energia total E em um potencial $U(x)$ é dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi \quad (4)$$

Para resolver essa equação, vamos considerar aqui um poço finito de comprimento L onde o potencial $U(x)$ representa uma constante positiva V_0 e que admite estados ligados ($E < 0$).

Dentre essas considerações, as equações a seguir são satisfeitas pela função de onda que não depende do tempo:

- **Região I:** $x < -L/2$, onde $U(x) = 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_1}{dx^2} = E\psi_1,$$

que pode ser escrita como

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} = \alpha^2\psi_1, \quad (5)$$

onde $\alpha = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$, com $E < 0$. A solução dessa diferencial ordinária possui uma solução geral da

forma

$$\psi_1(x) = Ae^{\alpha x} + Be^{-\alpha x}$$

que, para se tornar fisicamente admissível, deve-se analisar seu comportamento quando $x \rightarrow -\infty$. Com isso, observa-se que o segundo termo de $\psi_1(x)$ diverge, resultando em:

$$\psi_1(x) = Ae^{\alpha x} \quad \forall x < -L/2 \quad (6)$$

- **Região II:** $-L/2 \leq x \leq L/2$, onde $U(x) = -V_0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_2}{dx^2} - V_0\psi_2 = E\psi_2,$$

que pode ser expressa como

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} = -\beta^2\psi_2, \quad (7)$$

onde $\beta = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$.

Nessa região intermediária regida por $\psi_2(x)$, a solução geral pode ser expressa pela equação

$$\psi_2(x) = Ce^{i\beta x} + De^{-i\beta x}$$

No entanto, ao impor a condição de que a nossa função potencial é par, ou seja, $V(x) = V(-x)$, podemos supor, sem perda de generalidade, que as soluções são funções pares ou ímpares [18] e satisfazem a equação estacionária de Schrödinger com a mesma autoenergia E [4]. Portanto, expressar a solução em termos de senos e cossenos nos permite uma exploração mais direta dos resultados, ou seja:

$$\psi_2(x) = C \sin(\beta x) + D \cos(\beta x) \quad (8)$$

- **Região III:** $x > L/2$, onde $U(x) = 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_3}{dx^2} = -E\psi_3,$$

que pode ser escrita como

$$\frac{d^2\psi_3}{dx^2} = \alpha^2\psi_3, \quad (9)$$

A solução dessa diferencial ordinária possui uma solução geral análoga à que foi obtida para ψ_1 , ou seja:

$$\psi_3(x) = Fe^{\alpha x} + Ge^{-\alpha x}$$

Assim, quando $x \rightarrow \infty$, observa-se o primeiro termo de $\psi_3(x)$ divergir, resultando em:

$$\psi_3(x) = Ge^{-\alpha x} \quad \forall x > L/2$$

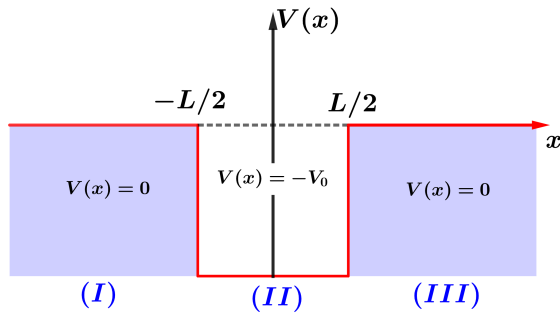


Figure 1: Poço de potencial com profundidade V_0 e comprimento L .

Dessa forma, a solução geral da equação (4) para cada uma das regiões representadas na (Figura 1) pode ser resumida na seguinte expressão:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\alpha x}, & x < -L/2 \\ C \sin(\beta x) + D \cos(\beta x), & -L/2 \leq x \leq L/2 \\ Ge^{-\alpha x}, & x > L/2 \end{cases} \quad (10)$$

Além disso, pode-se estabelecer uma relação entre cada uma dessas soluções observando as condições de contorno da função de onda:

1. A função de onda deve ser contínua em toda parte, incluindo nos pontos $x = -L/2$ e $x = L/2$, ou seja:

$$\psi_1\left(-\frac{L}{2}\right) = \psi_2\left(-\frac{L}{2}\right)$$

$$Ae^{-\alpha(L/2)} = -C \sin(\beta L/2) + D \cos(\beta L/2) \quad (11)$$

$$\psi_2\left(\frac{L}{2}\right) = \psi_3\left(\frac{L}{2}\right)$$

$$C \sin(\beta L/2) + D \cos(\beta L/2) = Ge^{-\alpha L/2} \quad (12)$$

2. A primeira derivada de $\psi(x)$ deve ser contínua ao longo de todo o seu domínio, inclusive nas fronteiras do poço finito, ou seja, em $x = -L/2$ e $x = L/2$. Portanto:

$$\psi'_1\left(-\frac{L}{2}\right) = \psi'_2\left(-\frac{L}{2}\right)$$

$$\alpha Ae^{-\alpha(L/2)} = \beta [C \cos(\beta L/2) + D \sin(\beta L/2)] \quad (13)$$

$$\psi'_2\left(\frac{L}{2}\right) = \psi'_3\left(\frac{L}{2}\right)$$

$$\beta [C \cos(\beta L/2) - D \sin(\beta L/2)] = -\alpha Ge^{-\alpha L/2} \quad (14)$$

Dessa forma, podemos expressar as equações (11), (12), (13), e (14), respectivamente, na forma de um sistema linear:

$$\begin{cases} Ae^{-\alpha(L/2)} = -C \sin(\beta L/2) + D \cos(\beta L/2) \\ \alpha Ae^{-\alpha(L/2)} = \beta C \cos(\beta L/2) + \beta D \sin(\beta L/2) \\ C \sin(\beta L/2) + D \cos(\beta L/2) = Ge^{-\alpha L/2} \\ \beta C \cos(\beta L/2) - \beta D \sin(\beta L/2) = -\alpha Ge^{-\alpha L/2} \end{cases} \quad (15)$$

Note que, apesar de se ter um sistema com 4 equações e 4 variáveis, verifica-se também equações que são múltiplas umas das outras. Em tais situações, o determinante da matriz formada pelos coeficientes do sistema é nulo [19], portanto:

$$\begin{vmatrix} e^{-\alpha \frac{L}{2}} & -\sin\left(\beta \frac{L}{2}\right) & \cos\left(\beta \frac{L}{2}\right) & 0 \\ \alpha e^{-\alpha \frac{L}{2}} & \beta \cos\left(\beta \frac{L}{2}\right) & \beta \sin\left(\beta \frac{L}{2}\right) & 0 \\ 0 & \sin\left(\beta \frac{L}{2}\right) & \cos\left(\beta \frac{L}{2}\right) & e^{-\alpha \frac{L}{2}} \\ 0 & \beta \cos\left(\beta \frac{L}{2}\right) & -\beta \sin\left(\beta \frac{L}{2}\right) & -\alpha e^{-\alpha \frac{L}{2}} \end{vmatrix} = 0$$

O cálculo desse determinante leva à equação:

$$\beta^2 - 2\beta\alpha \cot(2\beta L) - \alpha^2 = 0 \quad (16)$$

que possui duas soluções possíveis para α expressas por:

$$\alpha = -\beta (\cot(\beta L) \pm \csc(\beta L)) \quad (17)$$

onde a primeira solução corresponde a

$$\alpha = \beta \tan\left(\beta \frac{L}{2}\right) \quad (18)$$

enquanto a segunda é dada por

$$\alpha = -\beta \cot\left(\beta \frac{L}{2}\right) \quad (19)$$

Vemos assim, que ambos os resultados obtidas para a equação (17) são funções transcendentais e, dessa forma, são irreduzíveis a uma razão entre polinômios de modo que não podem ser expressas em termos de funções elementares nem possuem uma solução exata que possa ser expressa por funções conhecidas. Dessa maneira, o uso de métodos numéricos para obter uma solução torna-se imprescindível [6].

Lembrando que, nas equações (5) e (7), define-se os termos α e β como

$$\alpha = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad \beta = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar}.$$

Pode-se multiplicar ambas as equações por um parâmetro $L/2$ e, elevá-las ao quadrado e, em seguida, somá-las para obtermos:

$$\alpha^2 L^2 + \beta^2 L^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} L^2. \quad (20)$$

Observa-se que a equação (20) descreve um círculo centrado na origem de um plano $(\alpha L, \beta L)$, com um raio $R = (2mV_0)^{1/2}L/\hbar$. Dessa forma, nota-se que cada círculo formado a partir da equação (20) dependerá de V_0L^2 .

Os pontos resultantes das interseções entre a equação (20) e as soluções de α descritas em (18) e (19) determinam as energias pares e ímpares do sistema, respectivamente [20]. Para ilustrar, considere $R = 1$ e $R = 2$ na equação (20). Os valores de V_0 que satisfazem $(2mV_0)^{1/2}L/\hbar = 1$ e $(2mV_0)^{1/2}L/\hbar = 2$ correspondem a níveis energéticos específicos. Esses níveis energéticos são representados pelos pontos \blacktriangle e \blacklozenge na figura (2). Já para $R = 4$ ou seja, $V_0L^2 = 8m/\hbar^2$, a partícula pode ter dois estados pares com suas energias representadas pelos pontos \bullet .

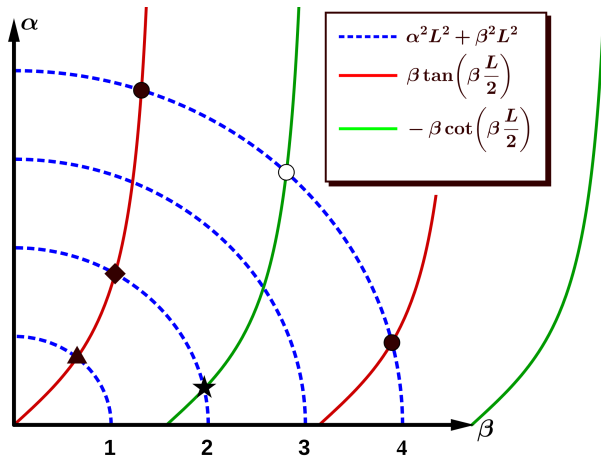


Figure 2: Solução gráfica das equações (5), (7) e (20).

Vale ainda observar que o círculo de raio $R = 2$ na figura (2) determina dois níveis energéticos: o estado fundamental par representados pelo ponto \blacklozenge , e um nível ímpar simbolizado pelo ponto \blacktriangle [20].

Portanto, pode-se perceber que a resolução gráfica da equação de Schrödinger é uma abordagem laboriosa e limitada em termos de precisão e acurácia, tornando-se praticamente inviável para sistemas quânticos maiores. Por outro lado, os métodos numéricos são mais versáteis e aplicáveis a uma ampla variedade de problemas físicos. Eles permitem o estudo de sistemas diversos, desde partículas isoladas até sólidos, moléculas complexas e sistemas em movimento, demandando uma quantidade razoável de recursos computacionais e proporcionando resultados muito mais precisos.

III. METODOLOGIA

A. Método de Diferenças Finitas

O método de diferenças finitas é utilizado para converter uma equação diferencial, seja ela ordinária ou par-

cial, linear ou não, em um sistema de equações algébricas. Nesse método, as incógnitas são os valores da função em cada ponto de um conjunto discreto de pontos, chamado de reticulado, que é obtido por meio da discretização da variável de integração x . É importante mencionar que o método possui certa ambiguidade, uma vez que as derivadas podem ser aproximadas utilizando diferenças finitas ascendentes, descendentes ou centradas em relação ao ponto desejado [21]. Quando é necessário estimar valores para pontos que não estão incluídos no conjunto discreto do domínio, é possível recorrer a técnicas de interpolação para obter uma estimativa aproximada desses valores [22].

A aplicação do método de diferenças finitas consiste em transformar o domínio contínuo em um domínio discreto, dividindo-o em pontos. Podemos definir um intervalo de $x = 0$ a $x = L$ como sendo nosso domínio para, em seguida, dividi-lo em um número específico de pontos com um espaçamento determinado. Portanto, quanto maior for o número de pontos utilizados, mais precisa será a solução, mas com um custo computacional igualmente elevado.

No método de diferenças finitas para o cálculo de derivadas em equações diferenciais, utiliza-se a fórmula de Taylor para obter aproximações desconsiderando-se os termos de ordem superior.

Dessa forma, para resolver a equação de Schrödinger no intervalo $[x_0, x_{n+1}]$, discretiza-se esse intervalo em uma malha de $n + 1$ pontos (Figura 3), dividindo-o em sub-intervalos de tamanho h definido como:

$$h = x_{i+1} - x_i, \quad (21)$$

de tal forma que cada ponto na malha seja dado por

$$x_i = x_0 + i \cdot h \quad i = 0, 1, \dots, n + 1. \quad (22)$$

No método das diferenças finitas, existem várias opções

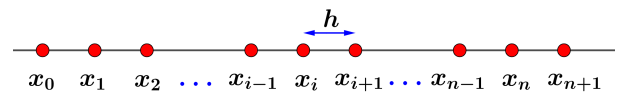


Figure 3: Representação de uma malha obtida por meio da discretização da variável de integração x .

para aproximar a segunda derivada, e uma delas é a segunda derivada centrada, que pode ser expressa da seguinte forma

$$\Psi''(x) = \frac{\psi(x+h) - 2\psi(x) + \psi(x-h)}{h^2} \quad (23)$$

Essa aproximação é calculada utilizando valores de pontos vizinhos ao ponto de interesse, de forma que a derivada seja estimada de maneira mais precisa.

Pode-se simplificar as equações a partir daqui usando o sistema de unidades naturais [23] e considerar $\hbar = m = 1$. Desse modo, a equação de Schrödinger (4) pode ser escrita como:

$$-\frac{1}{2} \frac{\psi_\alpha(x_{i+1}) - 2\psi_\alpha(x_i) + \psi_\alpha(x_{i-1}))}{h^2} + U(x_i)\psi_\alpha = E\psi_\alpha \quad (24)$$

Ao realizar cálculos numéricos, geralmente usamos um valor finito n para o número de pontos. Isso resulta em um número limitado de autoenergias, denotado por α_{max} , juntamente com seus correspondentes autoestados. A razão para isso é que, ao dividirmos o intervalo em n pontos, obtemos uma matriz $n \times n$, cuja equação característica é uma equação de grau n com n raízes que representam os n menores autovalores.

A precisão no cálculo dos autovalores de energia é aprimorada ao refinar o esquema de discretização, o que envolve o aumento do número de pontos n no reticulado e a redução do espaçamento h entre eles [21]. Ao aplicarmos a equação (29) de x_1 a x_n , obtém-se um sistema algébrico com n equações e $n + 2$ incógnitas, representando os valores da função $\psi(x_i)$ nos pontos $(x_0, x_1, \dots, x_{n+1})$. No entanto, determina-se os valores de $\psi(x_i)$ nesses pontos com base nas seguintes condições de contorno:

$$\psi_\alpha(x_0) = \psi_\alpha(x_{n+1}) = 0. \quad (25)$$

A condição de contorno expressa em (25) é adequada para encontrar autofunções localizadas de sistemas com potenciais finitos, como as autofunções correspondentes aos níveis discretos de energia de um poço de potencial. Entretanto, é importante considerar um intervalo suficientemente grande em relação à região classicamente permitida, onde as autofunções apresentam valores significativos [24]. Por conta disso, escolhemos $L = 20 a.u.$, um valor maior que os diâmetros atômicos dos elementos elencados na Tabela (I).

Portanto, ao impor a condição de contorno mencionada acima, obtém-se um sistema de equações algébricas que possui uma solução única. Expressa-se esse sistema como uma equação de autovalores que, na forma matricial, pode ser descrita ao considerar a função como um vetor coluna da seguinte maneira:

$$H(x_i) \begin{bmatrix} \psi_\alpha(x_1) \\ \psi_\alpha(x_2) \\ \vdots \\ \psi_\alpha(x_n) \end{bmatrix} = E_\alpha \begin{bmatrix} \psi_\alpha(x_1) \\ \psi_\alpha(x_2) \\ \vdots \\ \psi_\alpha(x_n) \end{bmatrix} \quad (26)$$

onde E_α a auto-energia correspondente a cada autofunção $\psi_\alpha(x_i)$ que, por sua vez, pode ser expresso pelo vetor coluna

$$\psi_\alpha(x_i) = \begin{bmatrix} \psi_\alpha(x_1) \\ \psi_\alpha(x_2) \\ \vdots \\ \psi_\alpha(x_n) \end{bmatrix} \quad (27)$$

O hamiltoniano $H(x_i) = \frac{1}{mh^2} + U(x_i)$ da equação (26) pode ser expresso na forma de uma matriz tridiagonal

dada por:

$$H(x_i) = \begin{bmatrix} h(x_1) & -\frac{1}{2h^2} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -\frac{1}{2h^2} & h(x_2) & -\frac{1}{2h^2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2h^2} & h(x_3) & -\frac{1}{2h^2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & -\frac{1}{2h^2} & \cdots & h(x_n) \end{bmatrix} \quad (28)$$

É importante observar que a matriz tridiagonal da equação (28) é real e simétrica, o que implica em sua diagonalizabilidade. Como resultado, existe uma base de autovetores associados.

Com esse objetivo em mente, desenvolvemos funções algébricas que fornecem soluções aproximadas para a equação de Schrödinger. Essas soluções permitem obter os valores de energia E em relação ao comprimento da caixa de potencial V de maneira conveniente e precisa.

O Python [25] é uma linguagem de programação popular e versátil, amplamente utilizada para realizar modelagens numéricas, incluindo o método de diferenças finitas. Com Python, é possível criar interfaces gráficas para interação do usuário com o modelo e integrar outras bibliotecas e ferramentas para fins específicos. As bibliotecas científicas como NumPy, SciPy e Matplotlib fornecem as funcionalidades necessárias para realizar essas modelagens de forma eficiente e conveniente. Utilizando scripts em Python (Apêndice A), implementa-se a equação (24) para modelar uma caixa de potencial com largura L , a qual está contida em um intervalo de integração consideravelmente maior, de $x_0 = -10$ a $x_{n+1} = 10$, dividido em 5.000 pontos. Conseqüentemente, o passo de integração será $h = \frac{20}{(n+1)}$, ou seja, $h = 0.004$. Portanto, a equação (24) fica assim escrita:

$$31250 [2\psi(x_i) - \psi(x_i + 0.004) - \psi(x_i - 0.004)] + U(x_i)\psi(x_i) = E\psi(x_i) \quad (29)$$

onde $i \in \{1, 2, \dots, n\}$.

B. Método Hartree-Fock

Com o objetivo de validar o método de diferenças finitas para resolver a equação de Schrödinger, utilizou-se como referência, o método Hartree-Fock [26–28], que é um método quântico de primeiros princípios (*ab initio*), em estrutura eletrônica, que soluciona de forma aproximada para o estado fundamental de um sistema de muitos corpos, como elétrons em um átomo, molécula(s) ou em uma estrutura periódica (sólido) [29, 30]. Utilizou-se o programa Gaussian 09 [31] com o método Hartree-Fock não restrito (*Unrestricted Hartree-Fock* ou UHF) para descrever os átomos isolados de H, Li, Na e K. O método Hartree-Fock não restrito foi utilizado, pois este formalismo considera as situações em que há elétrons desemparelhados [32], como os átomos em questão. Conjuntamente ao método UHF, utilizou-se um conjunto de base aumentada aug-cc-pVQZ [33–35]. A combinação

linear de conjuntos de bases é usada para descrever orbitais atômicos ou moleculares. A base aug-cc-pVQZ foi escolhida para descrever com qualidade e confiabilidade os átomos de H, Li, Na e K.

IV. RESULTADOS

Neste artigo, foi empregado o método numérico de diferenças finitas para resolver a equação de Schrödinger em uma caixa de potencial unidimensional, considerando os elementos H, Li, Na e K da família 1A da tabela periódica. Inicialmente, realizou-se uma estimativa das profundidades do poço potencial (V_0) que se aproximam melhor das energias do estado fundamental para esses átomos na aproximação Hartree-Fock com base aug-cc-pVQZ. Essa estimativa foi obtida levando-se em conta o diâmetro atômico (L) [36] e a energia correspondente (E) do estado fundamental, respectivamente, conforme apresentado na Tabela (I).

Table I: Átomo, diâmetro atômico (L), profundidade estimada da caixa (V_0) e a energia do estado fundamental do átomo na aproximação Hartree-Fock.

Elemento	L (Bohr)	V_0 (Ha)	E (Ha)
H	2.00000	-0.869085	-0.49995
Li	5.85815	-0.260690	-0.19636
Na	7.18096	-0.229200	-0.18219
K	8.88171	-0.180115	-0.14763

No Apêndice A é detalhado o *script* utilizado para obter as auto-energias e os vetores das funções de onda associadas a potenciais em formato de caixa finita. Com os dados obtidos, esboçou-se o formato de cada uma das caixas de potenciais, com suas larguras e energias específicas, bem como a amplitude da função de onda relacionada (Figura 4). Vale ressaltar que a posição próxima da linha que representa o estado de energia fundamental de cada uma das amplitudes das funções de onda representadas na Figura 4 é meramente ilustrativa, uma vez que, por conta de sua natureza probabilística, a amplitude da função de onda é sempre não negativa.

Para determinar a relação entre a energia (E), o potencial (V) e a largura (L) no caso do poço de potencial, realizou-se um ajuste de curva (*fit*) sobre os dados numéricos que relacionam o auto-valor de energia com o potencial e a largura da caixa, usando os dados da Tabela (I) para verificar a função encontrada está de acordo com os valores encontrados de auto-energia.

Utilizou-se um *script* em Python para ajustar uma função matemática aos dados fornecidos e encontrar os parâmetros que melhor descrevem o relacionamento entre as variáveis V , L e E (representados no Apêndice B como x , y e z , respectivamente). Assim, o modelo específico encontrado que melhor se ajustou aos nossos

dados pode ser expresso pela equação:

$$E(V, L) = a \cdot \ln(-V \cdot L) + b \cdot L \cdot \sqrt[3]{V} + c \quad (30)$$

Onde os parâmetros a , b e c são mostrados na Tabela (II).

O *script* mostrado no Apêndice B também calcula o R^2 , que é uma medida estatística bastante útil para avaliar se a função ajustada corresponde a uma boa representação da relação entre as variáveis x , y e z [37]. Em outras palavras, podemos dizer que o R^2 é usado para medir o quão bem a superfície ajustada pelo modelo se ajusta aos pontos de dados. Assim, quando temos R^2 próximo de 0 concluímos que o modelo sugerido não consegue explicar a variação dos dados, pois não se ajusta bem aos pontos experimentais, indicando que o modelo não é adequado para descrever a relação entre as variáveis. Por outro lado, quando R^2 é muito próximo de 1, o modelo se ajusta muito bem aos dados e consegue explicar a maior parte da variação observada nos pontos experimentais.

Nas simulações, o valor do R^2 obtido foi de 0.992, mostrando que a função expressa pela equação (30) constitui um excelente modelo para descrever os dados da Tabela (I).

Table II: : Valores dos parâmetros para a função $E(V, L)$

Parâmetro	Valor
a	-0.000647356137339
b	0.519336824404956
c	0.053798824983228

A Figura (5) exibe a superfície gerada pela função (30) com base nos valores de V_0 e L da Tabela (I). Através da graduação de cores nessa superfície, pode-se visualizar a relação entre os valores de V_0 e L e a energia E . Dessa forma, o gráfico facilita a visualização das situações limites: à medida que o valor do potencial aumenta e o da largura (diâmetro atômico) diminui, as energias verificadas diminuem (região em azul). Por outro lado, quanto menor for o valor do potencial e maior o da largura, a energia tende a aumentar (região em vermelho).

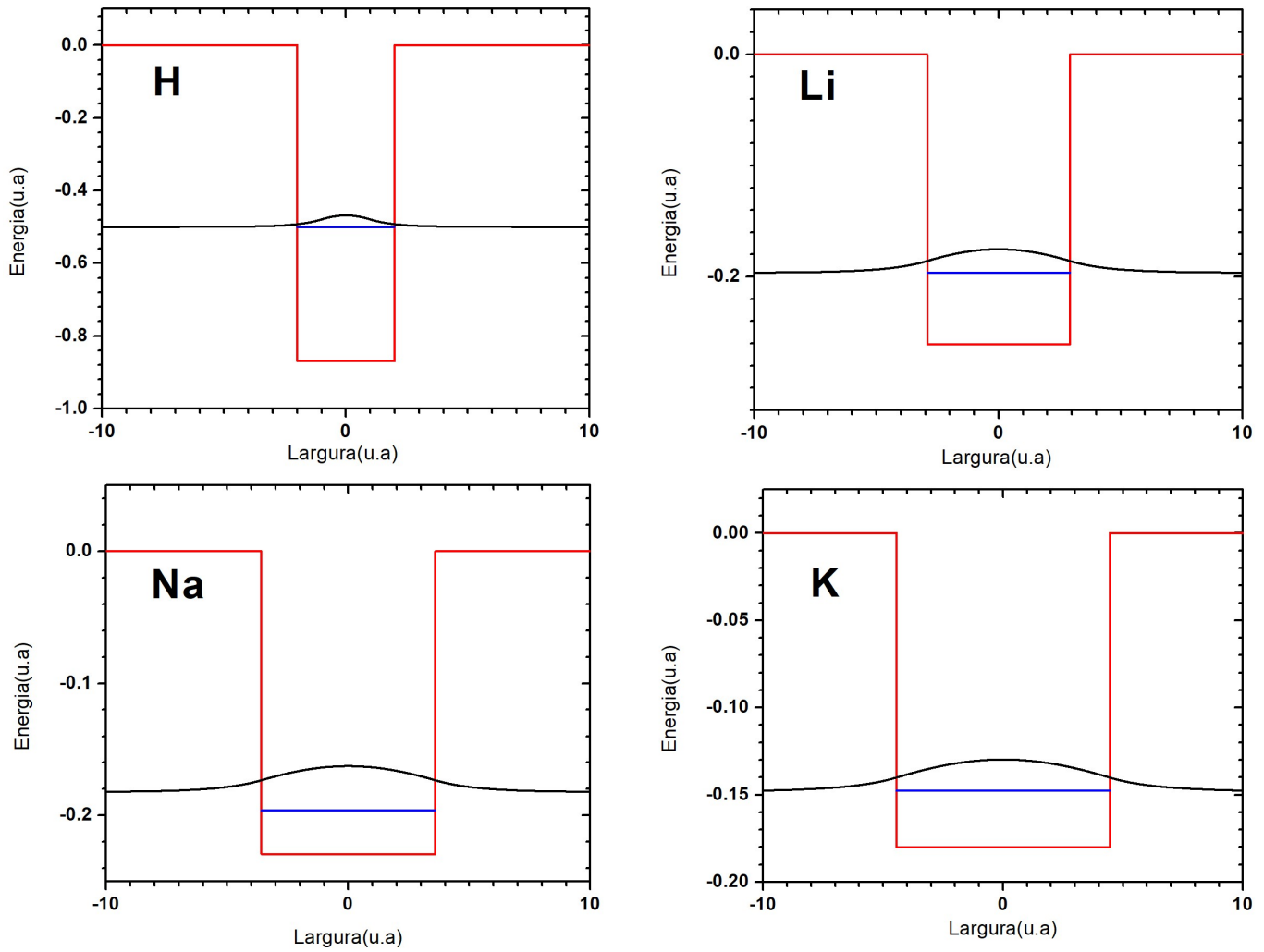


Figure 4: Comparação das funções de onda dos átomos Hidrogênio (H), Lítio (Li), Sódio (Na) e Potássio (K) com seus poços de potencial da Tabela I.

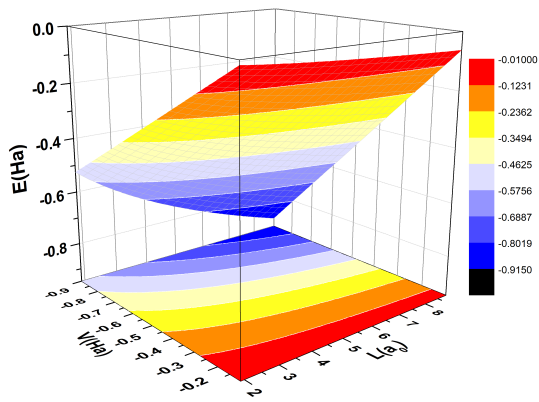


Figure 5: Gráfico da função de ajuste energia $E(V, L)$. Na parte inferior a projeção no plano $V \times L$.

V. CONCLUSÕES

Devido à grande complexidade envolvida na obtenção das auto-energias da equação Schrödinger para um poço de potencial finito usando métodos analíticos, é comum ver essas soluções sendo apresentadas de forma gráfica nos livros texto de física quântica. Por conta dessa limitação, propomos um algoritmo em python que produz a solução numérica por diferenças finitas dependendo apenas dos parâmetros V_0 (profundidade da caixa) e L (Largura da caixa). A partir destas soluções com uma ampla variação em V_0 no intervalo $(-0.180$ a -0.900 Ha) e L no intervalo $(2.0$ a 8.88 a.u.), determinamos para quais profundidades da caixa e diâmetros experimentais dos átomos hidrogenóides H, Li, Na e K, as energias do estado fundamental se aproximam com mais precisão (5 casas decimais) daquelas obtidas pelo método inteiramente *ab-initio*, como Hartre-Fock com uma base aug-cc-pVQZ. Desta forma, caracterizamos qual caixa de po-

tencial finita corresponde a cada um destes átomos. Portanto, podemos utilizar esta aproximação para resolver o problema de um único elétron sujeito a um potencial para obter o mesmo resultado (com boa aproximação) que o obtido pelo método Hartree-Fock, uma das técnicas mais utilizadas em mecânica quântica de muitos corpos. Além disso, com os 10 mil pontos de solução numéricas da equação de Schrödinger, propusemos uma função de

ajuste da forma: $E(V, L) = a \cdot \ln(-VL) + b \cdot L\sqrt[3]{V} + c$, que se ajusta muito bem aos dados gerados ($R^2 \simeq 0.992$). Esta função permite se estimar a profundidade da caixa para valores de auto-energias sem ter que resolver novamente a equação de Schrödinger. O código apresentado em python pode ser facilmente adaptado para estudar soluções de equação de Schrödinger para formas de potencial mais complexas que não possuem solução analítica.

-
- [1] C. ANDREWS and T. COBB, in *BULLETIN OF THE AMERICAN PHYSICAL SOCIETY* (AMER INST PHYSICS CIRCULATION FULFILLMENT DIV, 500 SUNNYSIDE BLVD, WOODBURY . . . , 1980) pp. 459–459.
- [2] V. A. Fock, Mir Publishers (1978).
- [3] E. Schrödinger, *Physical review* **28**, 1049 (1926).
- [4] M. Sousa and F. do Nascimento, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **42** (2020).
- [5] W. Thirring and P. Urban, *The Schrödinger Equation: Proceedings of the International Symposium “50 Years Schrödinger Equation” in Vienna, 10th–12th June 1976*, Vol. 17 (Springer Science & Business Media, 2012).
- [6] M. Sousa and F. do Nascimento, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **42** (2020).
- [7] P. A. M. Dirac, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* **117**, 610 (1928).
- [8] R. P. Feynman, *Reviews of modern physics* **20**, 367 (1948).
- [9] M. Born, *The British Journal for the Philosophy of Science* **4**, 95 (1953).
- [10] A. Makowski and S. Dembiński, *Physics Letters A* **154**, 217 (1991).
- [11] S. Doescher and M. Rice, *American Journal of Physics* **37**, 1246 (1969).
- [12] I. Hawk and D. Hardcastle, *Journal of Computational Physics* **21**, 197 (1976).
- [13] C. C. Marston and G. G. Balint-Kurti, *The Journal of chemical physics* **91**, 3571 (1989).
- [14] D. L. Aronstein and C. Stroud Jr, *American Journal of Physics* **68**, 943 (2000).
- [15] J. C. Strikwerda, *Finite difference schemes and partial differential equations* (SIAM, 2004).
- [16] A. W. Sandvik, Department of Physics, Boston University (2013).
- [17] D. Bennett, Dec-15 (2015).
- [18] D. J. Griffiths and D. F. Schroeter, *Introduction to quantum mechanics* (Cambridge university press, 2018).
- [19] S. LIPSCHUTZ, São Paulo: Makron (2002).
- [20] J. L. Lopes, *Introdução à teoria atômica da matéria* (Conselho Nacional de Pesquisas, Instituto Brasileiro de Bibliografia e . . . , 1957).
- [21] G. Monerat, L. Ferreira Filho, E. Silva, G. Oliveira-Neto, P. Nogueira, and A. de Assumpção, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **32**, 1304 (2010).
- [22] E. Fontana, Curitiba, PR: Universidade Federal do Paraná (2019).
- [23] J. D. Barrow, Pantheon (2002).
- [24] G. M. da Rocha Filho, A. R. Nunes, and G. G. da Luz, UFVM (2020).
- [25] M. Summerfield, *Programming in Python 3: a complete introduction to the Python language* (Addison-Wesley Professional, 2010).
- [26] C. C. J. Roothaan, *Rev. Mod. Phys.* **23**, 69 (1951).
- [27] J. C. Slater, *Phys. Rev.* **81**, 385 (1951).
- [28] V. Fock, *Zeitschrift für Physik* **61**, 126 (1930).
- [29] J. D. M. Viana, A. Fazzio, and S. Canuto, Editora Livraria da Física, São Paulo (2004).
- [30] J. Slater, *Quantum Theory of Matter*, International series in pure and applied physics (McGraw-Hill, 1968).
- [31] M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, X. Li, M. Caricato, A. V. Marenich, J. Bloino, B. G. Janesko, R. Gomperts, B. Mennucci, H. P. Hratchian, J. V. Ortiz, A. F. Izmaylov, J. L. Sonnenberg, D. Williams-Young, F. Ding, F. Lipparini, F. Egidi, J. Goings, B. Peng, A. Petrone, T. Henderson, D. Ranasinghe, V. G. Zakrzewski, J. Gao, N. Rega, G. Zheng, W. Liang, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, K. Throssell, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. J. Bearpark, J. J. Heyd, E. N. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, T. A. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. P. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, J. M. Millam, M. Klene, C. Adamo, R. Cammi, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, O. Farkas, J. B. Foresman, and D. J. Fox, “Gaussian 09 Revision D.01,” (2016), gaussian Inc. Wallingford CT.
- [32] A. Szabo and N. Ostlund, *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*, Dover Books on Chemistry (Dover Publications, 1996).
- [33] R. A. Kendall, J. Dunning, Thom H., and R. J. Harrison, *The Journal of Chemical Physics* **96**, 6796 (1992).
- [34] J. Dunning, Thom H., *The Journal of Chemical Physics* **90**, 1007 (1989).
- [35] B. P. Pritchard, D. Altarawy, B. Didier, T. D. Gibson, and T. L. Windus, *Journal of Chemical Information and Modeling* **59**, 4814 (2019).
- [36] J. C. Slater, *The Journal of Chemical Physics* **41**, 3199 (1964).
- [37] R. C. Quinino, E. A. Reis, and L. F. Bessegato, Belo Horizonte: UFMG (1991).
- [38] W. Greiner and W. Greiner, *Relativistic Quantum Mechanics: Wave Equations*, 1 (1990).
- [39] S. Young and A. Wierzbicki, in *ABSTRACTS OF PAPERS OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY*, Vol. 218 (AMER CHEMICAL SOC 1155 16TH ST, NW, WASHINGTON, DC 20036 USA, 1999) pp. U334–U334.

- [40] W. E. Boyce, R. C. DiPrima, and D. B. Meade, *Elementary differential equations and boundary value problems* (John Wiley & Sons, 2021).
- [41] E. W. Weisstein, MathWorld—A Wolfram Web Resource. zuletzt überprüft **13**, 2006 (2004).
- [42] R. Eisberg and R. Resnick, *Quantum physics of atoms, molecules, solids, nuclei, and particles* (1985).

Appendix A: Script em Python para encontrar as auto-energias em função do potencial e da largura, bem como as respectivas funções de onda dos elementos químicos relacionados na tabela (I).

```
import numpy as np
from scipy.linalg import eigh_tridiagonal
import matplotlib.pyplot as plt
import pandas as pd

# Constantes
Ev = 27.2114 #1 Hartee em Ev
Borh = 18.89725 #1 nm em Borh Radius
L = 10#em Borh
N = 5000 #Matriz
x = np.linspace(-L, L, N) # em Borh
dx = x[1] - x[0]

def cria_caixa(largura, in_box, out_box, x,
               ↪ N):
    #Unidades: nm,Ev,Borh,admensional
    U_vec = np.zeros(N)
    profundidade = in_box/Ev
    out_box = out_box/Ev
    largura = largura*Borh
    for i, y in enumerate(x): #i=posição
        ↪ ,y=valor
        if y < -largura/2 or y >largura/2:
            U_vec[i] = out_box
        else:
            U_vec[i] = -profundidade
    return U_vec

def resolve_autovalor(Potencial):
    d= Potencial + 1/(dx**2) # diagonal
    ↪ principal
    e= np.ones(N-1)/(-2*dx**2) # diagonais de
    ↪ cima e de baixo
    vals, vecs = eigh_tridiagonal(d, e,
    ↪ eigvals_only=False, select='a')
    #print(np.round(vals[:5],3)*Ev)
    return vals, vecs

def AcharV(L,V):
    Ev = 27.2114 #1 Hartee em Ev
    Borh = 18.89725 #1 nm em Borh Radius
    #largura,in_box,out_box,x,N
    Pot = cria_caixa(L/Borh, V*Ev, 0, x, N)
    #Unidades: nm,Ev,Borh,admensional
    vals, vecs = resolve_autovalor(Pot)
    print(vals[0])
    return vecs[:,0]

# Loop para encontrar o autovalor em função
↪ do Potencial e Largura.
potenciais = -np.linspace(-9.5, -1.5, 200)*Ev
↪ #em Ev
```

```

larguras = np.linspace(0.5, 10.5, 50)/Borh #
↳ em nm
dic = {'Potencial': [], 'Largura': [],
↳ 'Energia': []}

for i in potenciais:
    for y in larguras:
        V = cria_caixa(y,i, 0, x, N)
        ↳ #largura,in,out,x,N
        vals, vecs = resolve_autovalor(V)
        dic['Potencial'].append(-i)
        dic['Largura'].append(y)
        #print('-----')
        #print(f'Potencial: {i} \n Largura
        ↳ {y} \n Energia: {vals[0]}')
        dic['Energia'].append(vals[0])

#Salvando os Dados
dados = pd.DataFrame(dic)
dados.to_csv('Potencia_Largura_energia_refinado',
↳ index = False)

# Código para encontrar os vetores da função
↳ de onda
# Hidrogênio
vec = AcharV(2.00000, 0.869085)
df = pd.DataFrame(np.array((x, vec)).T)
df.to_csv('dados_H.dat', sep = ' ')

#Litio: *0.19636
vec = AcharV(5.85815,0.260690)
df = pd.DataFrame(np.array((x, vec)).T)
df.to_csv('dados_L.dat', sep = ' ')

#Sódio: -0.18219
vec = AcharV(7.18096,0.229200)
df = pd.DataFrame(np.array((x, vec)).T)
df.to_csv('dados_Na.dat', sep = ' ')

#Potassio: -0.14763
vec = AcharV(8.88171,0.180115)
df = pd.DataFrame(np.array((x, vec)).T)
df.to_csv('dados_K.dat', sep = ' ')

```

Appendix B: Script em Python para gerar os parâmetros da Tabela II

```

import numpy as np
from scipy.optimize import minimize

# Read the data file (replace 'data_file.csv'
↳ with your file path)
data = np.genfromtxt('caminho do arquivo de
↳ dados', delimiter=' ', skip_header=True)
x, y, z = data[:, 0], data[:, 1], data[:, 2]

```

```

# Define a função para o fit
def model_func(params, x, y):
    a, b, c = params
    return a * np.log(-x * y) + b * x *
    ↳ y**(1/3) + c

# Defina a função objetivo (soma dos resíduos
↳ quadrados)
def objective(params):
    return np.sum((model_func(params, x, y) -
    ↳ z)**2)

# Execute a otimização
initial_guess = [1.0, 1.0, 1.0] # chute
↳ inicial para a,b,e c
result = minimize(objective, initial_guess)

# Extrai os parâmetros otimizados
optimal_params = result.x
a_optimal, b_optimal, c_optimal =
↳ optimal_params

# Calcula o R-quadrado
def r_squared(y_actual, y_predicted):
    y_mean = np.mean(y_actual)
    ss_total = np.sum((y_actual - y_mean)**2)
    ss_residual = np.sum((y_actual -
    ↳ y_predicted)**2)
    r_sq = 1.0 - ss_residual / ss_total
    return r_sq

# Calcular R-quadrado para o modelo ajustado
z_predicted = model_func(optimal_params, x,
↳ y)
r_squared_value = r_squared(z, z_predicted)

# Calcular R-quadrado ajustado
num_data_points = len(z)
num_independent_vars = 3 # Number of
↳ independent variables in the model
↳ (a,b,c)
adjusted_r_squared = 1 - (1 -
↳ r_squared_value) * (num_data_points - 1)
↳ / (num_data_points - num_independent_vars
↳ - 1)

print("Optimized Parameters: a =", a_optimal,
↳ "b =", b_optimal, "c =", c_optimal)
print("R-squared:", r_squared_value)
print("Adjusted R-squared:",
↳ adjusted_r_squared)

# Plotagem dos resultados (opcional)
import matplotlib.pyplot as plt

fig, ax = plt.subplots()

```

```

# Valores mínimo e máximo desejados para a
↳ normalização
z_min_desired = -0.8
z_max_desired = 2.0

# Valores mínimo e máximo do intervalo da
↳ barra de cores
z_min_interval = -0.8
z_max_interval = 2.0

# Normalização personalizada de z para o
↳ intervalo desejado
z_normalized = (z - np.min(z)) / (np.max(z) -
↳ np.min(z))
z_adjusted = z_normalized * (z_max_desired -
↳ z_min_desired) + z_min_desired

ax.scatter(x, y, c=z_adjusted, cmap='jet',
↳ label='Data')
ax.set_xlabel(r'$V_0$ [U.A]')
ax.set_ylabel('L [U.A]')
ax.set_title('Dados e Função Ajustada')
x_grid, y_grid =
↳ np.meshgrid(np.linspace(min(x), max(x),
↳ 100), np.linspace(min(y), max(y), 100))
z_fit = model_func(optimal_params, x_grid,
↳ y_grid)
ax.contour(x_grid, y_grid, z_fit, levels=10,
↳ colors='black', linewidths=0.5)
cbar = plt.colorbar(ax.scatter(x, y,
↳ c=z_adjusted, cmap='jet', label='Data'),
↳ ticks=np.arange(z_min_interval,
↳ z_max_interval + 0.1, 0.4))

# Define o rótulo da barra de cores
cbar.set_label('E [Eh]')
#plt.legend()
plt.show()

def calc_func(params, x, y):
    a, b, c = optimal_params
    return a * np.log(-x * y) + b * x *
↳ y**(1/3) + c

print('a-energy= ',
↳ calc_func(optimal_params,-0.9, 2.81))

```