



Artigo

Resolução Numérica da Equação de Schrödinger usando o Método da Colocação Ortogonal

Lima, W. J.¹, Lobato, F. S.^{2,*} e Libotte, G. B.²

¹ Universidade Federal de Ouro Preto - Ouro Preto, MG, Brasil

² Universidade Federal de Uberlândia - Uberlândia, MG, Brasil

³ Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro - Nova Friburgo, RJ, Brasil

* Email para correspondência: fslobato@ufu.br

Received: 01/12/22; Accepted: 13/12/22; Published: 31/01/23

Resumo: O estudo da equação de Schrödinger configura-se como uma das relações de grande interesse na ciência devido as inúmeras aplicações que podem ser desenvolvidas, dentre as quais pode-se citar estudos de caso na física do estado sólido e molecular, nuclear, partículas e estruturas. Neste contexto, o presente trabalho tem como objetivo propor uma metodologia para a resolução numérica da equação de Schrödinger usando o Método da Colocação Ortogonal. Esta abordagem consiste em reescrever o modelo original parcial diferencial em um equivalente constituído por um sistema diferencial ordinário. Para validar a metodologia proposta, dois estudos de caso puramente matemáticos e um físico com o potencial de Pöschl-Teller, são resolvidos. Os resultados obtidos demonstram que a abordagem proposta configura-se uma boa alternativa para a resolução desta classe de problemas.

Palavras-chave: Equação de Schrödinger; Colocação Ortogonal; Potencial de Pöschl-Teller; Método Numérico.

Abstract: The study of Schrödinger equation configures a field of great interest in science due to numerous applications that can be developed, among then we can cite case studies in solid and molecular physics, nuclear, particle and structures. In this context, the present work aims to propose a methodology for numerically solving the Schrödinger equation using the Orthogonal Collocation Method. This approach consists of rewriting the original partial differential model into an equivalent model constituted by an ordinary differential system. To validate the proposed methodology, two mathematical case studies and one physical considering the Pöschl-Teller potential, are solved. The results obtained demonstrate that the proposed approach is a good alternative for solving this class of problems.

Keywords: Schrödinger Equation; Orthogonal Collocation; Pöschl-Teller Potential; Numerical Method.

1. Introdução

No início do século XX, evidências experimentais sugeriram que as partículas atômicas também possuíam natureza ondulatória. Como exemplo, descobriu-se que os elétrons dão padrões de difração e interferência quando passam por uma fenda dupla de maneira semelhante às ondas de luz. Portanto, é razoável supor que uma equação de onda poderia explicar o comportamento das partículas atômicas e subatômicas (Fock 1978; Greiner, 1990). Thomas Young, em 1801, evidenciou o caráter ondulatório da luz. Os experimentos do efeito fotoelétrico, descoberto por Heinrich Hertz, e do espalhamento de raios X por um pedaço de grafite, proposto por Arthur Compton em 1923, observaram um caráter corpuscular da luz. Tais estudos contribuíram para a análise sobre o comportamento dual não só da matéria mas também da luz (Griffiths e Schroeter, 2018).

A proposta de Ervin Schrodinger teve sua origem em 1923 com Louis de Broglie, que postulou que toda partícula em movimento tem uma onda associada a ela (onda de matéria), comportamento este que ficou conhecido dualidade onda-partícula. Schrödinger, seguindo a hipótese de Broglie, construiu uma equação diferencial de segunda ordem para

racionalizar a natureza ondulatória da matéria e da partícula que se correlaciona com a onda (Fock, 1978). A expressão proposta é análoga à equação para ondas clássicas da Ótica Física, que assume que a partícula se comporta como onda e produz solução em termos de uma relação denominada de equação de onda. Quando esta é resolvida, tem-se a função de onda e a energia da partícula. Entre 1926 e 1927, Erwin Schrödinger associou a representação ondulatória de partículas na equação de conservação de energia total (energia cinética + energia potencial), derivando a equação para descrever seu comportamento, sendo esta conhecida como equação de Schrödinger (Fock, 1978; Greiner, 1990). Uma vez que a função de onda é conhecida, outras grandezas que caracterizam o comportamento da partícula podem ser deduzidas desta função de onda. Assim sendo, a função de onda é muito importante, e teve sua interpretação física, proposta por Max Born, de que o quadrado absoluto desta função estima a probabilidade de encontrar a partícula em uma determinada região do espaço em um determinado instante de tempo (Fock, 1978; Greiner, 1990).

Esta equação é central para todas as aplicações da mecânica quântica, incluindo a teoria quântica de campos, que incorpora a relatividade especial com a mecânica quântica (Greiner, 1990). Na matemática, a equação de Schrödinger e suas variantes configuram uma das expressões mais estudadas no campo das equações diferenciais parciais com aplicações em geometria, teoria espectral e de espalhamento e sistemas integráveis (Fock, 1978; Greiner, 1990).

Em linhas gerais, resolver a equação de Schrödinger não é uma tarefa trivial, sendo a solução analítica só possível de ser encontrada para sistemas particulares. Como exemplo deste tipo de abordagem pode-se citar os modelos analíticos desenvolvidos por Makowski e Dembinski (1991) e por Griffiths e Schroeter (2018). Por outro lado, os métodos numéricos têm sido, naturalmente, empregados para resolver a equação de Schrödinger. Neste cenário, Orszag (1972) realizou uma comparação entre métodos para aproximação pseudo-espectral e espectral para a equação de Schrödinger. Marston e Balint-Kurti (1989) desenvolveram o método Hamiltoniano de malha de Fourier para a estimação dos autovalores e das autofunções. Robinson e Fairweather (1994) empregaram o Método de Colocação Spline Ortogonal para uma equação do tipo Schrödinger. Aronstein e Stroud (2000) implementaram a série geral para níveis de energia de poços quadrados finitos para uso em estudos de pacotes de ondas. Monovasilis e Kalogiratos (2003) estudaram métodos de ajuste exponencial para a integração numérica da equação de Schrödinger.

Strikwerda (2004) e Pereira et al. (2004) obtiveram a solução numérica da equação de Schrödinger usando o Método das Diferenças Finitas. Pereira et al. (2004) também aplicaram o Método Variacional para a obtenção da solução da equação de Schrödinger 1D submetida ao potencial de Pöschl-Teller. Jackiewicz e Zubik-Kowal (2006) utilizaram o Método de Colocação Espectral e Métodos de Relaxamento para resolver a equação de Schrödinger. Sandvik (2013) obteve uma solução numérica da equação de Schrödinger usando o Método de Numerov. England e Savari (2009) implementaram o Método Pseudo-Espectral para a resolução de equações diferenciais ordinárias lineares, com aplicação na equação de Schrödinger. Khan et al. (2022) empregaram o Método de Crank-Nicolson para a resolução da equação de Schrödinger. Modanli et al. (2022) propuseram duas abordagens baseadas no Método de Decomposição de Laplace para a resolução da equação de Schrödinger nos formatos parabólico e pseudo-parabólico.

De acordo com o que foi apresentado, a presente contribuição tem por objetivo propor uma metodologia para a resolução numérica da equação de Schrödinger em sua forma original, isto é; sem transformar o modelo original (parcial diferencial) em um equivalente (com duas equações diferenciais ordinárias) usando o Método da Colocação Ortogonal. Este trabalho está estruturado como segue. A equação de Schrödinger é apresentada na seção 2. Em seguida, a metodologia proposta é descrita na seção 3. Posteriormente, os resultados obtidos considerando três estudos de caso são apresentados na seção 4. Por fim, a última seção apresenta as conclusões deste trabalho.

2. Equação de Schrödinger

Como destacado anteriormente, o objetivo desta contribuição é propor uma abordagem para a resolução da equação de Schrödinger unidimensional. Esta é representada por uma equação diferencial parcial linear complexa descrita como (Griffiths e Schroeter, 2018):

$$\theta_1 \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \theta_2 \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + \theta_3 \Psi(x,t) \quad (1)$$

$$\Psi(x,0) = \varphi_1 \quad (2)$$

$$\Psi(a,t) = \varphi_2 \quad (3)$$

$$\Psi(b,t) = \varphi_3 \quad (4)$$

em que x e t representam as coordenadas espacial e temporal, respectivamente, $\Psi(x,t)$ é a função de onda e φ_j ($j=1, 2, 3$) representam as condições (inicial e de contorno) necessárias para a integração do modelo no intervalo $a \leq x \leq b$. θ_j ($j=1, 2,$

3) são funções que caracterizam o modelo de interesse. θ_1 é uma função que depende da constante de Planck e de um número complexo $i = \sqrt{-1}$. θ_2 é uma função que depende da constante de Planck e da massa da partícula. Finalmente, θ_3 é a função potencial característica de cada situação de interesse.

Cabe ressaltar que, a depender dos valores de θ_j a equação de Schrödinger apresenta solução analítica. Por exemplo, para potenciais independentes do tempo, isto é, θ_3 não é função do tempo, pode-se aplicar o método de separação de variáveis ($\Psi(x,t)=\Theta(x)\phi(t)$) de forma a transformar o modelo original (Equações (1)-(4)) no seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias:

$$\theta_2 \frac{d^2\Theta(x)}{dx^2} + \theta_3\Theta(x) = E\Theta(x) \quad (5)$$

$$\theta_1 \frac{d\phi(t)}{dt} = E\phi(t) \quad (6)$$

em que E é a energia e Θ e ϕ são variáveis auxiliares.

Se θ_1 e E não forem funções do tempo, a Equação (6) pode ser facilmente integrada considerando a condição inicial ϕ_1 , resultando em:

$$\phi = \phi_1 \exp\left(\frac{E}{\theta_1} t\right) \quad (7)$$

Neste caso, resolver o modelo descrito pela Equações (1)-(4) reduz-se a encontrar Θ considerando as condições de contorno φ_2 e φ_3 , já que ϕ é facilmente obtida. Apesar desta possibilidade, conforme comentado anteriormente, o objetivo deste trabalho é resolver o sistema dado pelas Equações (1)-(4) e não o modelo para Θ , já que nem sempre é possível usar o método da separação de variáveis.

A próxima seção apresenta a descrição da metodologia proposta neste trabalho para resolver a equação de Schrödinger dada pelas Equações (1)-(4).

3. Metodologia

O Método da Colocação Ortogonal (MCO) consiste em aproximar a variável dependente de uma equação diferencial (ordinária ou parcial) por um polinômio de forma que este satisfaça determinados pontos dentro do domínio de interesse (Villadsen e Michelsen, 1978). O Número de Pontos de Colocação (NPC) deve ser definido de forma que as condições de contorno sejam contempladas nesta aproximação. Estes pontos são obtidos considerando uma função ortogonal no domínio de interesse X . Para este objetivo, considere-se a seguinte relação recursiva (Villadsen e Michelsen, 1978):

$$\Pi_i^{(x,\eta)}(X) = (X + \chi_i)\Pi_{i-1}(X) + \eta_i\Pi_{i-2}(X) \quad (8)$$

em que Π é uma função polinomial e χ e η são coeficientes definidos a partir da aproximação considerada.

As raízes desta equação são obtidas considerando um polinômio ortogonal de grau NPC, o peso $W(X)$ e a seguinte condição de Galerkin (Villadsen e Michelsen, 1978):

$$\int_0^1 W(X)(\chi X + \eta)\Pi_i^{(x,\eta)}(X)dX = 0, \quad i = 0, 1, \dots, NPC - 2 \quad (9)$$

Multiplicando a Equação (8) por $\Pi_{i-2}(X)$ e integrando, a seguinte relação é obtida:

$$\eta_i = -\frac{\int_0^1 XW(X)\Pi_{i-1}(X)\Pi_{i-2}(X)dX}{\int_0^1 W(X)\Pi_{i-2}^2(X)dX} \quad (10)$$

Analogamente, multiplicando a Equação (8) por $\Pi_{i-1}(X)$ e integrando, o parâmetro χ pode ser obtido, i.e.:

$$\chi_i = -\frac{\int_0^1 XW(X)\Pi_{i-1}^2(X)dX}{\int_0^1 W(X)\Pi_{i-1}^2(X)dX} \quad (11)$$

Se $\Pi_{i-2}(X) = 0$, $\Pi_{i-1}(X) = 1$ e $W(X) = 1$ determina-se os parâmetros χ e η e, conseqüentemente, o polinômio ortogonal (Laranjeira e Pinto, 2001). As raízes deste polinômio são os pontos de colocação. Já para a aproximação polinomial considera-se o polinômio de Lagrange (PL) devido à redução do custo computacional em comparação com outras aproximações (Laranjeira e Pinto, 2001).

Assim sendo, considerando os pontos $(X_1, Y_1), (X_2, Y_2), \dots, (X_{NPC+1}, Y_{NPC+1})$, o polinômio de interpolação com grau igual a NPC é dado por:

$$Y_{NPC}(X) = \sum_{i=1}^{NPC+1} Y_i l_i(X) \quad (12)$$

em que $l_i(X)$ é o polinômio de interpolação de Lagrange, definido como:

$$l_i(X) = \prod_{j=1, j \neq i}^{NPC+1} \frac{X - X_j}{X_i - X_j} \quad (13)$$

Se o subscrito i for igual a j , $l_i(X)$ é igual a 1. Caso contrário, $l_i(X)$ é igual a 0. Neste caso, as derivadas (primeira e segunda) podem ser facilmente obtidas a partir desta aproximação. Por exemplo, para a derivada primeira no ponto X_j tem-se:

$$\frac{dY_{NPC}(X_j)}{dX} = \sum_{i=1}^{NPC+1} Y_i \frac{dl_i(X_j)}{dX}, \quad j = 1, 2, \dots, NPC + 1 \quad (14)$$

Substituindo o polinômio e suas respectivas derivadas obtêm-se os resíduos para cada ponto de colocação e estes devem ser iguais a zero, bem como devem satisfazer as condições iniciais e de contorno (caso o problema seja de valor no contorno).

De forma geral, a aplicação do MCO exige os seguintes passos (Laranjeira e Pinto, 2001):

- Parâmetros de entrada: domínio do problema, função peso para a determinação do polinômio ortogonal, grau NPC da aproximação;
- Estimar o polinômio ortogonal de grau NPC;
- Calcular as NPC raízes (pontos de colocação) do polinômio ortogonal;
- Determinar as equações (resíduo nos pontos de colocação), satisfazendo as condições de contorno;
- Resolver o sistema de equações resultantes;
- Verificar se a solução obtida não é modificada com o aumento do grau da aproximação.

Enfatiza-se que os pontos de colocação devem estar no domínio $[0, 1]$ pelo fato de trabalhar com um polinômio ortogonal. Assim, a variável independente, caso esteja fora desse domínio, deve ser redefinida (através da mudança de variável simples) para que esta condição seja atendida. Cabe ressaltar que o aumento no NPC não necessariamente implica na melhora da qualidade da solução obtida, bem como pode-se ter um comportamento oscilatório devido a esse aumento (Villadsen e Michelsen, 1978).

4. Resultados e Discussão

Nesta seção são apresentados os resultados obtidos pela metodologia proposta. Neste caso, os seguintes pontos são destacados:

- Como a metodologia proposta consiste em transformar uma equação diferencial parcial com contribuição complexa em um sistema de equações diferenciais ordinárias com contribuição complexa, faz-se necessário integrar o modelo final. Para essa finalidade considera-se o Método de Runge-Kutta-Fehlberg (com 50 pontos de discretização na direção temporal, definidos após simulações preliminares). Neste caso, o MCO obtém um sistema com NPCx50 equações diferenciais de valor inicial;
- Para avaliar a qualidade da solução obtida pela metodologia proposta, considera-se como métrica o erro absoluto (Ξ) em pontos definidos em cada aplicação. Matematicamente:

$$\Xi = |\Delta_{analítica} - \Delta_{numérica}| \quad (15)$$

onde os subscritos analítica e numérica representam os valores exatos e numéricos, respectivamente, e operadores Re e Im representam as partes real e imaginária, respectivamente. Já o operador Δ é definido como $\text{Re}(\Psi)+\text{Im}(\Psi)$ (Re e Im representam as partes real e imaginária, respectivamente);

- Para mensurar o tempo de processamento (TP) em cada uma das aplicações foi considerado um microcomputador Desktop Intel Core i7-4770 com 8GB de memória.

4.1. Estudo de Caso 1

A primeira aplicação foi proposta e estudada por Khan et al. (2022) e considera a equação de Schrödinger com as seguintes informações: $\theta_1=i; \theta_2=1; \theta_3=0; [a b]=[-2 \ 2]$; e solução analítica igual a $\Psi(x,t)=\exp(it)\sin(x)$. Neste caso, os valores de φ_j ($j=1, 2, 3$) podem ser facilmente obtidos a partir da solução analítica apresentada.

Na Tabela 1 são apresentados os erros absolutos considerando a influência do NPC para o primeiro estudo de caso em $x = [0,2 \ 0,4 \ 0,6 \ 0,8]$ e para t igual a unidade.

Tabela 1. Erro absoluto computado para o primeiro estudo de caso considerando diferentes valores para o NPC ([3 4 5]) e x ([0,2 0,4 0,6 0,8]) e para t igual a unidade.

NPC	x=0,2	x=0,4	x=0,6	x=0,8	TP (s)
3	$1,6545 \times 10^{-5}$	$1,9545 \times 10^{-5}$	$3,5656 \times 10^{-5}$	$1,7898 \times 10^{-5}$	0,023
4	$3,8665 \times 10^{-7}$	$2,7554 \times 10^{-7}$	$2,2321 \times 10^{-7}$	$1,3122 \times 10^{-7}$	0,098
5	$1,1124 \times 10^{-8}$	$3,1554 \times 10^{-8}$	$2,6596 \times 10^{-8}$	$1,9876 \times 10^{-8}$	0,125

Nesta tabela é possível constatar que o aumento no valor do parâmetro NPC implica na redução do erro absoluto. Este resultado está em concordância com o esperado já que o aumento no valor deste parâmetro implica em um sistema diferencial ordinário com maior número de equações, o que na prática significa um maior refinamento da solução numérica proposta. Como consequência, o TP aumenta com o incremento do NPC. Enfatiza-se que os resultados obtidos estão em concordância com aqueles reportados por Khan et al. (2022) usando o Método de Crank–Nicolson. Todavia estes autores obtiveram um erro da ordem de, aproximadamente, 10^{-3} , que é maior que os estimados pelo MCO considerando diferentes valores para o NPC, demonstrando a qualidade da metodologia proposta.

Nas Figuras 1(a,b) são apresentados os perfis analíticos e numéricos de Ψ em função de x considerando $t=[0,25 \ 0,50 \ 0,75 \ 1]$ e NPC igual a 5. Nestas figuras percebe-se que o MCO foi capaz de obter boas estimativas em comparação com a solução analítica.

4.2. Estudo de Caso 2

A segunda aplicação matemática, proposta e estudada por Modanli et al. (2022), considera $\theta_1=i; \theta_2=1; \theta_3=2it(x^2-x)-2(t^2-1); [a b]=[0 \ 1]$; e solução analítica igual a $(x^2-x)(t^2-1)$. As condições iniciais (φ_1) e de contorno (φ_2 e φ_3) são obtidas a partir da solução analítica apresentada.

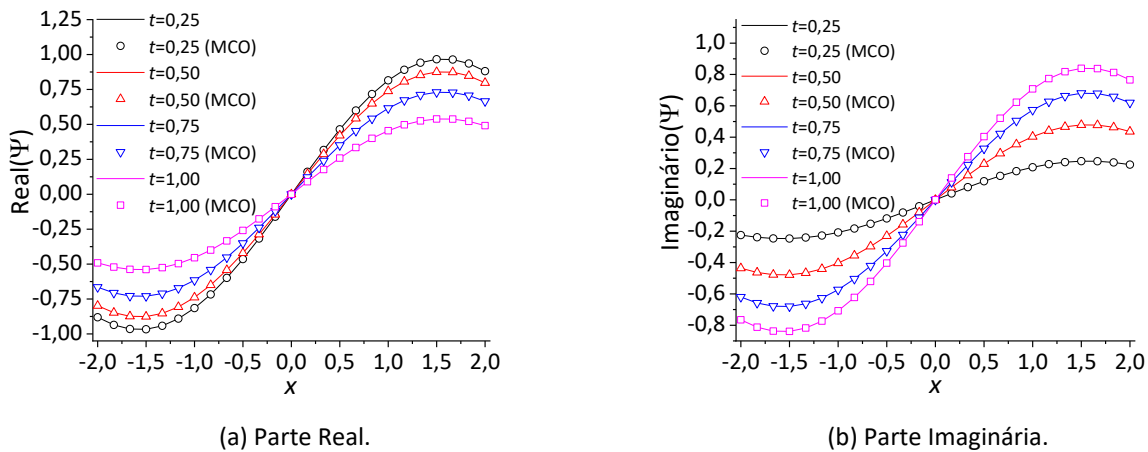


Figura 1. Perfis de Ψ (real e imaginário) para o primeiro estudo de caso considerando NPC igual a 5.

Na Tabela 2 são apresentados os erros absolutos considerando a influência do NPC para o segundo estudo de caso em algumas posições de x ([0,2 0,4 0,6 0,8]) e para t igual a unidade. Nesta tabela observa-se, assim como o estudo de caso anterior, que o incremento de NPC implica na redução do erro absoluto, bem como no aumento no valor do TP. Em relação ao trabalho de Modanli et al. (2022), que empregou o Método da Decomposição de Laplace Modificado, os resultados obtidos usando o MCO estão em concordância. Todavia, os erros reportados por estes autores são da ordem de 10^{-3} , enquanto os obtidos pelo MCO são, no máximo, da ordem de 10^{-6} . Isto demonstra que a metodologia proposta foi capaz de obter estimativas mais precisas que o trabalho de Modanli et al. (2022).

Tabela 2. Erro absoluto computado para o segundo estudo de caso considerando diferentes valores para o NPC ([3 4 5]) e x ([0,2 0,4 0,6 0,8]) e para t igual a unidade.

NPC	$x=0,2$	$x=0,4$	$x=0,6$	$x=0,8$	TP (s)
3	$1,4989 \times 10^{-6}$	$6,4377 \times 10^{-6}$	$6,8445 \times 10^{-6}$	$2,8445 \times 10^{-6}$	0,035
4	$1,2322 \times 10^{-8}$	$5,6762 \times 10^{-8}$	$7,3245 \times 10^{-8}$	$9,2033 \times 10^{-8}$	0,167
5	$4,5545 \times 10^{-9}$	$5,6666 \times 10^{-9}$	$3,3335 \times 10^{-9}$	$4,5104 \times 10^{-9}$	0,234

Na Figura 2 é apresentado o perfil (analítico e numérico) de Ψ considerando NPC igual a 5 e $t = [0,25 0,5 0,75 0,95]$. Assim como no estudo de caso anterior, percebe-se nesta figura que o MCO foi capaz de obter boas estimativas em relação à solução analítica.

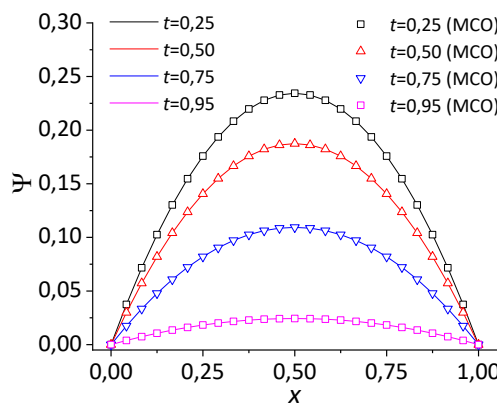


Figura 2. Perfil de Ψ para o segundo estudo de caso considerando NPC igual a 5.

4.2. Estudo de Caso 3

A última aplicação considera a equação de Schrödinger submetida ao potencial de Pöschl-Teller (Pereira et al., 2004). Este potencial apresenta o formato hiperbólico conforme ilustrado na Figura 3, que V_0 é a amplitude/profundidade do potencial.

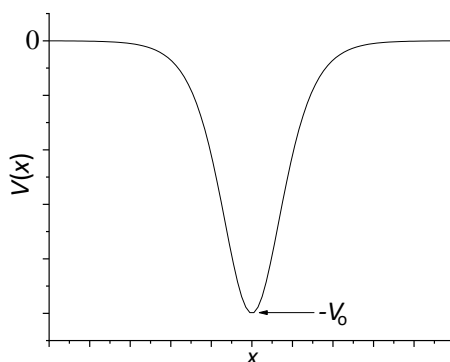


Figura 3. Potencial de Pöschl-Teller com amplitude V_0 (Pereira et al., 2004).

Para este modelo consideram-se (Pereira et al., 2004): $\theta_1=i$; $\theta_2=-1/2$; $\theta_3=-V_0\text{sech}^2(x)$ ($V_0=1$); $[a\ b]=[-5\ 5]$ e solução analítica dada como:

$$\Psi = \exp(-iEt) \sqrt[4]{\frac{\omega}{\pi}} \exp\left(-\frac{\omega x^2}{2}\right) \quad (16)$$

em que $E=-0,4908$ e $\omega=0,7259$. Assim como nos estudos de caso anteriores, as condições iniciais (φ_1) e de contorno (φ_2 e φ_3) são obtidas a partir da solução analítica apresentada.

Na Tabela 3 são apresentados os erros absolutos considerando a influência do NPC para o terceiro estudo de caso para $x = [-4\ -2\ 2\ 4]$ e t igual a unidade.

Tabela 3. Erro absoluto computado para o segundo estudo de caso considerando diferentes valores para o NPC ([3 4 5]) e x ([-4 -2 2 4]) e para t igual a unidade.

NPC	$x=-4$	$x=-2$	$x=2$	$x=4$	TP (s)
3	$2,4447 \times 10^{-6}$	$5,9898 \times 10^{-6}$	$2,0054 \times 10^{-6}$	$2,6455 \times 10^{-6}$	0,245
4	$2,0403 \times 10^{-7}$	$3,7687 \times 10^{-7}$	$2,0896 \times 10^{-7}$	$2,6444 \times 10^{-7}$	0,547
5	$2,1656 \times 10^{-8}$	$2,9999 \times 10^{-8}$	$3,0545 \times 10^{-8}$	$2,3554 \times 10^{-8}$	0,955

Nesta tabela observa-se, assim como nos estudos de caso anteriores, que o aumento no valor do NPC implica no aumento da precisão e do tempo de processamento. Também constata-se que os resultados obtidos estão em concordância com aqueles reportados por Pereira et al. (2004) considerando o Método Variacional e o Método das Diferenças Finitas.

Nas Figuras 4(a,b) são apresentados os perfis analíticos e numéricos da variável Ψ considerando NPC igual a 5 e $t = [1\ 2 \dots 10]$. Conclui-se com esta figura que o MCO foi capaz de obter boas estimativas para todos os perfis em relação às respectivas soluções analíticas.

Do ponto de vista físico, observa-se nestas figuras o comportamento oscilatório deste sistema em ambas as contribuições (real e imaginária). Além disso, como o parâmetro E é negativo, o termo $\exp(-iEt)$ da Eq.(16) é positivo. Assim, quanto o tempo tender ao infinito, o sistema continua oscilando visto que a exponencial de um complexo é dado em função de senos e cossenos (Fórmula de Euler).

O potencial de Pöschl-Teller pertence a uma classe de potenciais que resultam em soluções da Equação de Schrödinger escritas através de funções especiais. Neste caso, a solução possui caráter gaussiano que pode ser visto nas partes (a) e (b) da Figura 4. À medida que o tempo aumenta, a curva altera sua concavidade mas não a forma gaussiana como esperado. Vale ressaltar que o resultado apresentado não é o quadrado absoluto da função de onda. Caso fosse, a parte imaginária deveria ser desprezada por não possuir significado físico.

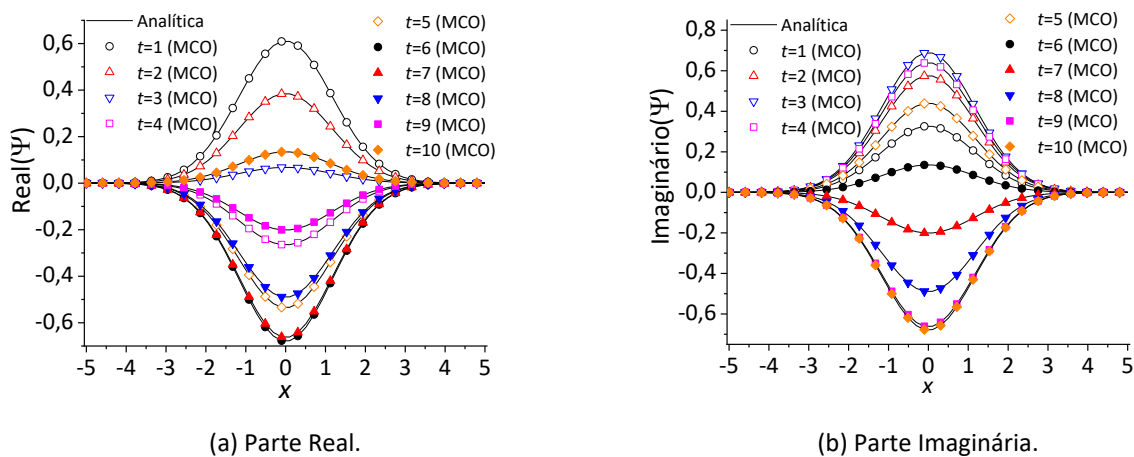


Figura 4. Perfis de Ψ (real e imaginário) para o terceiro estudo de caso considerando NPC igual a 5.

5. Conclusões

A Nesta contribuição, o Método da Colocação Ortogonal foi utilizado para a resolver a equação de Schrödinger. A metodologia proposta foi aplicada a três estudos de caso que apresentam solução analítica. Os dois primeiros são puramente matemáticos e o terceiro considera o potencial de Pöschl-Teller. A partir dos resultados obtidos é possível constatar uma boa concordância entre os perfis estimados e analíticos considerando poucos pontos de colocação e, conseqüentemente, menores tempos processamento. Isto representa a principal vantagem da abordagem proposta. Como proposta de trabalho futuro pretende-se analisar a equação de Schrödinger no contexto fracionário.

Referências

1. FOCK, V. Fundamentals of Quantum Mechanics, Mir Publishers, Moscow, 1978.
2. GREINER, W. Relativistic Quantum Mechanics, Berlin: Springer, 1990.
3. GRIFFITHS, D. J.; SCHROETER, D. F. Introduction to Quantum Mechanics. Cambridge University Press. Third Edition, 508 pages, 2018.
4. MAKOWSKI, A. J.; DEMBINSKI, S. T. Exactly Solvable Models with Time Dependent Boundary Conditions, Physics Letters A, 154(5-6), 217-220, 1991.
5. ORSZAG, S. Comparison of Pseudospectral and Spectral Approximation, Studies in Applied Mathematics, 51(3), 253-259, 1972.
6. MARSTON, C.; BALINT-KURTI, G. The Fourier Grid Hamiltonian Method for Bound State Eigenvalues and Eigenfunctions, The Journal of Chemical Physics, 91(6), 3571-3576, 1989.
7. ROBINSON, M.; FAIRWEATHER, G. Orthogonal Spline Collocation Methods for Schrodinger Type Equation in One Space Variable, Numerisch Mathematik, 68(3), 355-376, 1994.
8. ARONSTEIN, D.; STROUD, C.. General Series Solution for Finite Square-Well Energy Levels for use in Wave-Packet Studies, American Journal of Physics, 68(10), 943-949, 2000.
9. MONOVASILIS, T.; KALOGIRATOU, Z. Exponential-Fitting Symplectic Methods for the Numerical Integration of the Schrödinger Equation. Computational Methods In Sciences And Engineering, 37(3), 446-450, 2003.
10. STRIKWERDA, J. Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations, Second Edition, Philadelphia, SIAM, 2004.
11. PEREIRA, L. C.; FERREIRA, J. V. B.; NASCIMENTO, V. A. Soluções Variacionais e Numéricas da Equação de Schrödinger 1D Submetida ao Potencial de Pöschl-Teller. Revista Principia, 48, 156-168, 2004.
12. JACKIEWICZ, Z.; ZUBIK-KOWAL, B. Spectral Collocation and Waveform Relaxation Methods for Nonlinear Delay Partial Differential Equation, Applied Numerical Mathematics, 56(3-4), 433-443, 2006.
13. SANDVIK, A. Numerical Solutions of the Schrödinger Equation, Department of Physics, Boston University, 2013.
14. ENGLAND, R.; SAVARI, M. On the Pseudo-Spectral Method of Solving Linear Ordinary Differential Equations, Journal of Mathematics and Statistics, 5(2), 136-140, 2009.

15. KHAN, A.; AHSAN, M.; BONYAH, E.; JAN, R.; NISAR, M.; ABDEL-ATY, A.-H.; YAHIA, I. S. Numerical Solution of Schrödinger Equation by Crank–Nicolson Method, *Mathematical Problems in Engineering*, 11 pages, 2022.
16. MODANLI, M.; BAJJAH, B.; KUSULAY, S. Two Numerical Methods for Solving the Schrödinger Parabolic and Pseudoparabolic Partial Differential Equations, *Advances in Mathematical Physics*, 2022, 10 pages, 2022.
17. VILLADSEN, J.; MICHELSEN, M. L. *Solution of Differential Equation Models by Polynomial Approximation*, 1978.
18. LARANJEIRA, P.; PINTO, J.C. *Metodos Numéricos em Problemas de Engenharia Química*, Editora EPapers, 316, ISBN 85-87922-11-4, 1a ed, 2001.