



INSTITUTO FEDERAL DO SERTÃO PERNAMBUCANO  
CAMPUS SERRA TALHADA  
CURSO DE LICENCIATURA EM FÍSICA

JONAS FERNANDO NASCIMENTO MORAIS

**Estudo dos Osciladores Harmônico, Anarmônico e  
Quântico: Uma Abordagem Analítica e  
Computacional com o Wolfram Mathematica**

JONAS FERNANDO NASCIMENTO MORAIS

**Estudo dos Osciladores Harmônico, Anarmônico e Quântico: Uma  
Abordagem Analítica e Computacional com o Wolfram Mathematica**

Trabalho de Conclusão de Curso de Licenciatura em Física do Instituto Federal do Sertão Pernambucano campus Serra Talhada como requisito para a obtenção do título de Licenciado em Física.  
Orientador: Prof. Dr. Daniel de Souza Santos

Serra Talhada - PE  
2025

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

---

M828    Morais, Jonas Fernando Nascimento.

Estudo dos Osciladores Harmônico, Anarmônico e Quântico: Uma Abordagem Analítica e Computacional com o Wolfram Mathematica / Jonas Fernando Nascimento Morais. - Serra Talhada, 2025.  
51 f. : il.

Trabalho de Conclusão de Curso (Licenciatura em Física) -Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sertão Pernambucano, Campus Serra Talhada, 2025.

Orientação: Prof. Dr. Daniel de Souza Santos.

1. Física. 2. Osciladores harmônicos. 3. Osciladores anarmônicos. 4. Wolfram Mathematica. I. Título.

CDD 530

---

JONAS FERNANDO NASCIMENTO MORAIS

**Estudo dos Osciladores Harmônico, Anarmônico e Quântico: Uma Abordagem Analítica e Computacional com o Wolfram Mathematica.**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Coordenação do Curso de Licenciatura em Física do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sertão Pernambucano, Campus Serra Talhada, como requisito parcial obtenção do título de Licenciado em Física.

Aprovado em: 10/02/2025

**BANCA EXAMINADORA**

Documento assinado digitalmente



**DANIEL DE SOUZA SANTOS**

Data: 11/06/2025 15:11:46-0300

Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

---

**Prof. Daniel de Souza Santos**  
IFSertãoPE – Campus Serra Talhada – Orientador

Documento assinado digitalmente



**EMERSON JOSE FREITAS DA SILVA**

Data: 12/06/2025 20:58:30-0300

Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

---

**Prof. Emerson Jose Freitas da Silva**  
IFSertãoPE – Campus Serra Talhada – Examinador interno

Documento assinado digitalmente



**ERICK EDUARDO PEREIRA SOUZA**

Data: 11/06/2025 15:44:27-0300

Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

---

**Prof. Erick Eduardo Pereira Souza**  
IFSertãoPE – Campus Serra Talhada – Examinador interno

Documento assinado digitalmente



**ALESSIO TONY BATISTA CELESTE**

Data: 12/06/2025 07:55:50-0300

Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

---

**Prof. Aléssio Tony Batista Celeste.**  
IFPB - Campus Catolé do Rocha – Examinador Externo

## AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço a Deus, fonte suprema de sabedoria e guia constante em minha jornada acadêmica. É pela Sua graça e orientação que me sinto capacitado para realizar este trabalho e alcançar esta conquista. A Ele dedico não apenas este momento, mas cada passo dado ao longo deste percurso. Expresso minha profunda gratidão ao professor Dr. Daniel e Dr. Alessio, cuja orientação sábia e apoio constante foram fundamentais para o desenvolvimento deste trabalho. Sua dedicação e paciência foram verdadeiros pilares ao longo deste processo.

À minha família, minha eterna fonte de amor, encorajamento e apoio inabalável com seu constante incentivo foi meu combustível nos momentos de desafio e dúvida. Aos meus amigos e colegas, que compartilharam comigo não apenas momentos de estudo, mas também de descontração e apoio mútuo. Suas contribuições e amizade tornaram esta jornada acadêmica mais leve e significativa. Agradeço também a todos os professores e profissionais que, de alguma forma, contribuíram para o meu crescimento acadêmico e pessoal ao longo desta trajetória.

Por fim, expresso minha gratidão novamente a Deus, fonte de toda sabedoria e inspiração, por me guiar e me sustentar em cada passo deste percurso. Que todo conhecimento adquirido seja utilizado para contribuir positivamente com a sociedade e com o mundo ao meu redor..

*"Deleita-te também no Senhor, e te concederá os desejos do teu coração. "*

Salmo 37:4

## RESUMO

Este projeto de conclusão de curso tem como objetivo principal o estudo aprofundado dos Osciladores Harmônico Quântico e Anarmônico Quântico. Esses sistemas, amplamente utilizados em Física e Engenharia, apresentam características distintas que os tornam relevantes para a compreensão de fenômenos naturais e tecnológicos. O oscilador harmônico, com sua "simplicidade", serve como ponto de partida para a análise dos princípios básicos de oscilação. Já o oscilador anarmônico, com seus comportamentos não lineares, introduz desafios adicionais, proporcionando um modelo mais próximo de sistemas reais. Por fim, o oscilador quântico é abordado como uma extensão no domínio da mecânica quântica, destacando a quantização de energia e seus estados estacionários. A abordagem adotada neste trabalho combina métodos analíticos e computacionais, com ênfase no uso do software Wolfram Mathematica. Este software é amplamente reconhecido por sua capacidade de resolver equações diferenciais complexas, oferecer soluções exatas ou aproximadas de alta precisão e gerar representações gráficas detalhadas. A "cereja do bolo" deste estudo é a resolução e análise detalhada desses osciladores, utilizando o Mathematica para explorar suas propriedades dinâmicas. Por meio de simulações computacionais, são destacadas as principais diferenças entre os osciladores harmônicos, anarmônicos clássico, anarmônicos quântico e o quântico. Além de validar as soluções computacionais com métodos analíticos tradicionais, o trabalho discute as implicações desses resultados contribuindo para uma compreensão mais profunda dos osciladores, também reforça a importância das ferramentas computacionais no avanço da pesquisa científica e no ensino de sistemas físicos complexos.

**Palavras-chave:** osciladores harmônicos; osciladores anarmônicos; osciladores quânticos; Wolfram Mathematica.

## ABSTRACT

This final course project has as its main objective the in-depth study of Quantum Harmonic and Quantum Anharmonic Oscillators. These systems, widely used in Physics and Engineering, present distinct characteristics that make them relevant for the understanding of natural and technological phenomena. The harmonic oscillator, with its "simplicity", serves as a starting point for the analysis of the basic principles of oscillation. The anharmonic oscillator, with its nonlinear behaviors, introduces additional challenges, providing a model closer to real systems. Finally, the quantum oscillator is addressed as an extension in the domain of quantum mechanics, highlighting the quantization of energy and its steady states. The approach adopted in this work combines analytical and computational methods, with emphasis on the use of Wolfram Mathematica software. This software is widely recognized for its ability to solve complex differential equations, offer high-precision exact or approximate solutions and generate detailed graphical representations. The cherry on the cake of this study is the resolution and detailed analysis of these oscillators, using Mathematica to explore their dynamic properties. Through computational simulations, the main differences between harmonic, classical anharmonic, quantum anharmonic and quantum oscillators are highlighted. In addition to validating the computational solutions with traditional analytical methods, the work discusses the implications of these results contributing to a deeper understanding of oscillators, and also reinforces the importance of computational tools in advancing scientific research and teaching complex physical systems.

**Keywords:** harmonic oscillators; anharmonic oscillators; quantum oscillators; Wolfram Mathematica.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Edifício Comcast . . . . .	12
Figura 2 – Comando Plot . . . . .	14
Figura 3 – Comando Solve para equações algébricas . . . . .	31
Figura 4 – NSolve para equações algébricas . . . . .	32
Figura 5 – Função de Onda do estado $n= 1, 2, 3$ e $4$ do Oscilador Harmônico Quântico	40
Figura 6 – Relação da função de onda com os níveis de energia da partícula . . .	41
Figura 7 – Função de Onda do estado $n= 0$ e $1$ do Oscilador Anarmônico Quântico	42
Figura 8 – Código para o Oscilador Harmônico Quântico . . . . .	48
Figura 9 – Código para o Oscilador Anarmônico Quântico . . . . .	50

## LISTA DE SÍMBOLOS

$\hbar$  Constante de Planck reduzida.

$\omega$  Frequência angular do oscilador.

$E$  Energia total do sistema.

$K$  Constante elástica.

$m$  Massa do oscilador.

$\psi$  Função de onda no contexto quântico.

$\phi$  Ângulo de fase do oscilador.

$V(x)$  Potencial do sistema, com  $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$  para o oscilador harmônico.

$V_{\text{anarmônico}}(x)$  Potencial para o oscilador anarmônico, como  $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + \alpha x^4$ .

$\alpha$  Parâmetro que define o termo anarmônico no potencial.

$n$  Número quântico do oscilador harmônico.

$\omega_0$  Frequência angular natural do oscilador harmônico.

$x$  Deslocamento do oscilador a partir da posição de equilíbrio.

$\langle E_n \rangle$  Energia esperada no estado quântico  $n$ .

$\langle x \rangle$  Valor médio da posição do oscilador.

$\langle p \rangle$  Valor médio da quantidade de movimento do oscilador.

$\hbar\omega$  Energia do primeiro estado excitado do oscilador harmônico quântico.

$\lambda$  Parâmetro de comprimento característico em sistemas quânticos.

$\beta$  Parâmetro que define a interação ou o amortecimento no sistema.

$\omega_n$  Frequência dos modos normais em um sistema multidimensional.

$\gamma$  Coeficiente de amortecimento no sistema anarmônico.

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b> .....	<b>12</b>
<b>2</b>	<b>REVISÃO TEÓRICA</b> .....	<b>14</b>
2.1	CONTEXTUALIZAÇÃO SOBRE OS OSCILADORES NA FÍSICA E ENGENHARIA . . . . .	14
2.2	OSCILADOR HARMÔNICO CLÁSSICO . . . . .	15
2.3	OSCILADOR HARMÔNICO QUÂNTICO . . . . .	17
<b>2.3.1</b>	<b>Equação de Schrödinger</b> .....	<b>17</b>
<b>2.3.2</b>	<b>Resolução pelo Método Analítico</b> .....	<b>19</b>
2.3.2.1	<i>Solução por séries de potência</i> .....	22
2.3.2.2	<i>Auto energias do Oscilador Harmônico Quântico</i> .....	25
2.3.2.3	<i>Autofunções do Oscilador Harmônico Quântico</i> .....	26
<b>2.3.3</b>	<b>Número Quântico <math>n</math></b> .....	<b>27</b>
2.3.3.1	<i>Interpretação Física de <math>n</math></i> .....	27
2.4	OSCILADOR ANARMÔNICO CLÁSSICO . . . . .	27
2.5	OSCILADOR ANARMÔNICO QUÂNTICO . . . . .	28
2.6	INTRODUÇÃO AO WOLFRAM MATHEMATICA . . . . .	31
<b>2.6.1</b>	<b>Soluções simbólicas</b> .....	<b>33</b>
<b>2.6.2</b>	<b>Soluções Numéricas</b> .....	<b>33</b>
<b>2.6.3</b>	<b>Uso do Mathematica para soluções simbólicas e numéricas</b> .....	<b>34</b>
<b>2.6.4</b>	<b>Principais Pontos a Destacar</b> .....	<b>34</b>
<b>3</b>	<b>METODOLOGIA</b> .....	<b>36</b>
3.1	METODOLOGIA DOS MODELOS MATEMÁTICOS . . . . .	37
<b>3.1.1</b>	<b>Modelo para o Oscilador Harmônico Quântico</b> .....	<b>37</b>
<b>3.1.2</b>	<b>Modelagem Analítica do Oscilador Harmônico Quântico</b> .....	<b>37</b>
<b>3.1.3</b>	<b>Procedimentos Metodológicos</b> .....	<b>37</b>
<b>3.1.4</b>	<b>Análise Comparativa</b> .....	<b>38</b>
<b>3.1.5</b>	<b>Diferenças e Semelhanças entre os Estados Quânticos</b> .....	<b>38</b>
<b>3.1.6</b>	<b>Conclusões da Metodologia</b> .....	<b>38</b>
<b>3.1.7</b>	<b>Modelo para o Oscilador Anarmônico Quântico</b> .....	<b>39</b>
<b>3.1.8</b>	<b>Procedimentos Metodológicos – Simulação Numérica do Oscilador Anarmônico Quântico</b> .....	<b>39</b>
<b>4</b>	<b>RESULTADOS</b> .....	<b>41</b>
4.1	GRÁFICOS DAS SOLUÇÕES QUÂNTICAS . . . . .	41
4.2	OSCILADOR HARMÔNICO QUÂNTICO . . . . .	41
<b>4.2.1</b>	<b>Representação Gráfica</b> .....	<b>41</b>
<b>4.2.2</b>	<b>Validação Teórica por Comparação com a Literatura</b> .....	<b>42</b>
<b>4.2.3</b>	<b>Pontos Positivos da Implementação Computacional</b> .....	<b>43</b>

---

4.3	OSCILADOR ANARMÔNICO QUÂNTICO . . . . .	44
4.3.1	<b>Forma das Autofunções</b> .....	45
4.4	COMPARAÇÃO ENTRE OS OSCILADORES HARMÔNICO E ANARMÔNICO QUÂNTICO . . . . .	45
5	<b>CONCLUSÃO</b> .....	47
	<b>REFERÊNCIAS</b> .....	49-50
	<b>ANEXO A- DESCRIÇÃO DO CÓDIGO PARA REPRESENTAÇÃO DAS FUNÇÕES DE ONDA DO OSCILADOR HARMÔNICO . .</b>	51-52
	<b>ANEXO B- DESCRIÇÃO DO CÓDIGO PARA REPRESENTAÇÃO DAS FUNÇÕES DE ONDA DO OSCILADOR ANARMÔNICO QUÂNTICO . . . . .</b>	53-54

## 1 INTRODUÇÃO

O oscilador harmônico sempre foi considerado o problema não trivial mais simples e o modelo básico para qualquer paradigma mecânico. Logo no início da física clássica, Galileu Galilei encontrou (1583) uma lei que descrevia o caráter isócrona ( refere-se à propriedade de um sistema oscilatório em que o período das oscilações independe da amplitude, desde que a amplitude seja pequena) de pequenas oscilações de um pêndulo simples [1, p.154].

Essa lei foi fundamental para o desenvolvimento da física clássica e serviu como alicerce para muitos outros estudos de sistemas vibracionais. Contudo, embora os osciladores harmônicos sejam frequentemente envolvidos na teoria devido à sua simplicidade e previsibilidade, o estudo dos osciladores anarmônicos desempenha um papel crucial na compreensão de características vibracionais mais complexas, que estão presentes em uma variedade de sistemas físicos.

Enquanto osciladores anarmônicos oferecem uma perspectiva mais realista, refletindo as não linearidades presentes em sistemas do mundo real a necessidade de compreender esses sistemas complexos motiva a investigação eficiente para a resolução de suas equações diferenciais associadas.

O objetivo geral deste trabalho é resolver as equações diferenciais que descrevem os osciladores citados, tanto por meio de métodos analíticos tradicionais quanto por abordagens numéricas utilizando o software Wolfram Mathematica. Para isso, será realizada uma revisão dos principais métodos analíticos empregados na solução dessas equações, seguida da implementação de técnicas numéricas para comparação com as soluções tradicionais. Além disso, será explorado o uso do Wolfram Mathematica como ferramenta computacional para modelagem, simulação e análise das soluções desses sistemas, permitindo avaliar a eficiência e precisão das abordagens numéricas em relação às analíticas, destacando suas vantagens e limitações.

O uso do Mathematica permitirá explorar uma gama de soluções que seriam difíceis de obter apenas por métodos analíticos convencionais, proporcionando uma análise detalhada e uma comparação das soluções em termos de precisão e eficiência.

Ao longo deste estudo, será dada atenção especial às implicações práticas dessas abordagens, que vão desde o comportamento de sistemas físicos até aplicações em engenharia e tecnologias emergentes. Com isso, espera-se não apenas uma compreensão mais profunda dos osciladores em suas diferentes formas, mas também uma contribuição significativa para a aplicação de métodos numéricos avançados na resolução de problemas complexos.

A metodologia adotada incluirá uma revisão bibliográfica sobre osciladores, suas classificações e os métodos de resolução aplicáveis, com especial ênfase no uso de ferramentas computacionais, como o Wolfram Mathematica.

---

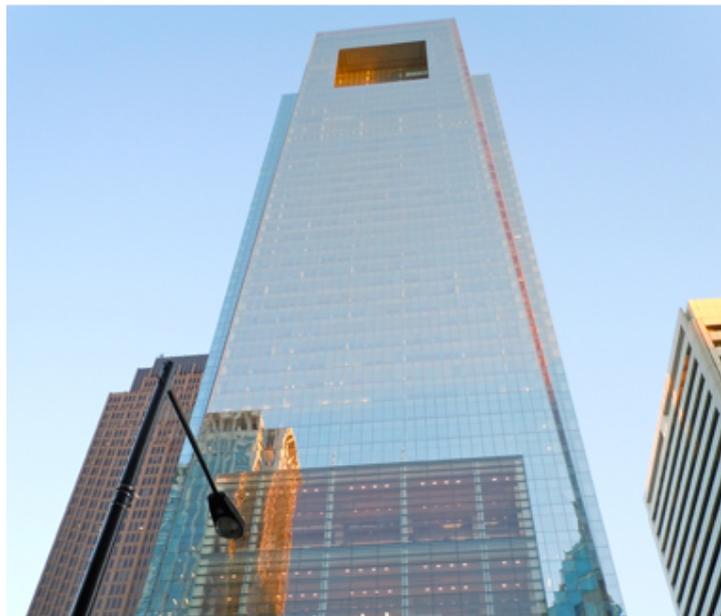
A análise dos resultados será conduzida separadamente, a fim de avaliar as diferenças e semelhanças entre os tipos de osciladores, destacando as vantagens e limitações de cada abordagem. fornecendo insights importantes para o avanço do conhecimento e suas aplicações no modelo.

## 2 REVISÃO TEÓRICA

### 2.1 CONTEXTUALIZAÇÃO SOBRE OS OSCILADORES NA FÍSICA E ENGENHARIA

Os osciladores aparecem em várias áreas, desde a Física Clássica até a Mecânica Quântica e engenharia. Por exemplo, uma aplicação na engenharia seria o Edifício Comcast na Filadélfia, Pensilvânia, fica aproximadamente 305 metros (1000 pés) de altura.

Figura 1 – Edifício Comcast



Fonte: 2.

À medida que os edifícios são construídos mais altos, eles podem funcionar como pêndulos físicos invertidos, com o topopisos oscilando devido à atividade sísmica e ventos flutuantes [2, p.723].

Pode-se observar que os fenômenos oscilatórios vai muito além da engenharia de estruturas como foi apresentado acima, podendo ser abrangido em sistemas que variam, tais como: a eletrônica (circuitos eletrônicos e equipamentos de ressonância magnética), acústica e até mesmo na medicina, mostrando ser multifuncional a importância desses conceitos oscilatórios na vida cotidiana.

Mudando de aplicações do mundo macroscópico e caindo no mundo subatômico no qual pode-se aplicar as oscilações em casos como o átomo de hidrogênio que pode ser analisado em certos contextos utilizando o modelo de oscilador harmônico quântico, especialmente quando se estudam as transições de energia e vibrações moleculares. Esse tipo de análise se insere no estudo de sistemas subatômicos, dada a natureza das partículas envolvidas e a importância do oscilador está no fato de ser o protótipo mais geral de um sistema físico que envolva oscilações [3, p.395].

## 2.2 OSCILADOR HARMÔNICO CLÁSSICO

Dentre os sistemas envolvendo forças que variam suavemente com a posição, o mais simples é o oscilador harmônico, em que a partícula experimenta uma força de restauração que cresce linearmente com sua distância da origem [4, p.53]. A equação modelo para o oscilador harmônico clássico é uma massa  $m$  atrelada a uma constante de mola de força  $k$  no qual o movimento é descrito pela lei de Hooke. —

$$F = -kx \quad (1)$$

- $F$ : força restauradora,
- $k$ : constante elástica,
- $x$ : deslocamento em relação à posição de equilíbrio.

De acordo com a Segunda Lei de Newton ( $F=ma$ ), podemos reescrever essa equação como:

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -kx \quad (2)$$

Dividindo toda a equação por  $m$ , obtém a equação diferencial que descreve o movimento do Oscilador Harmônico:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = 0 \quad (3)$$

Sendo  $\omega$  :

$$\omega = \sqrt{\frac{K}{m}} \quad (4)$$

A solução geral dessa equação diferencial é dada por:

$$x(t) = A \cos(\omega t) \quad (5)$$

onde:

- $A$ : amplitude do movimento,
- $\phi$ : fase inicial.

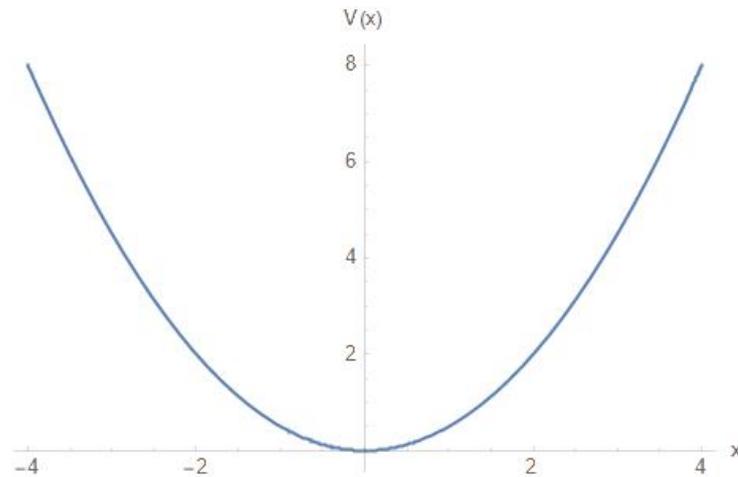
A energia potencial é dada pela seguinte expressão:

$$V(x) = \frac{1}{2} K x^2 \quad (6)$$

Graficamente podemos observar que:

A figura apresenta o gráfico da função  $V(x)$ , que assume a forma de uma parábola voltada para cima. No eixo horizontal ( $x$ ), os valores variam de -4 a 4, enquanto no eixo vertical ( $V(x)$ ), os valores vão de 0 a 8. O vértice da parábola está localizado na origem (0,0), indicando que este é o ponto de mínimo local da função.

Figura 2 – Comando Plot



Fonte: Autor.

O gráfico demonstra que, à medida que  $x$  se afasta do vértice em ambas as direções, o valor de  $V(x)$  aumenta, refletindo a natureza do potencial em um oscilador harmônico. Essa representação visual enfatiza a relação entre a forma quadrática do potencial e o comportamento de oscilação de sistemas físicos, ressaltando a aproximação de que o potencial pode ser considerado aproximadamente parabólico em torno do mínimo local. Essa característica é fundamental na análise de sistemas oscilatórios, especialmente quando se considera pequenas oscilações.

Pode-se perceber que o gráfico gerado da função  $V(x)$  é uma parábola. É claro que não existe um oscilador harmônico perfeito; se você esticar demais a mola ela irá se romper e, previsivelmente, a lei de Hooke falhará muito antes de esse ponto ter sido alcançado. [5, p.30]

A ideia de que qualquer potencial é aproximadamente parabólico em torno de um mínimo local está relacionada à expansão em série de Taylor.

A série de Taylor é uma representação matemática de uma função como uma soma infinita de termos calculados a partir das derivadas da função em um ponto específico.

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n \quad (7)$$

No contexto de um potencial mínimo local, podemos considerar um ponto onde a derivada primeira é zero (um mínimo local). Formalmente, podemos expressar como uma série de Taylor ao redor desse mínimo.

$$V(x) = V_0(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{V''(x_0)}{2!} (x - x_0)^2 + \dots + \frac{V^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n + \dots \quad (8)$$

Onde  $V_0$  é o valor do potencial no mínimo e  $V''(x_0)$  é a segunda derivada do potencial avaliada no ponto  $x_0$ , e assim por diante. Admitindo que  $V'(x_0) = 0$  (sendo um

mínimo), podemos descartar os termos de ordem superior (aqueles que são de ordem maior que 2, já que estamos interessados apenas nas pequenas oscilações), e assim obtemos:

$$V(x) = \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 \quad (9)$$

A presença do termo quadrático destaca a natureza parabólica do potencial em torno do mínimo local. Essa é a contribuição dominante em muitos casos, especialmente quando estamos interessados no comportamento próximo ao mínimo.

A forma parabólica implica que, nas proximidades do mínimo local, o potencial se assemelha ao de um oscilador harmônico simples. Isso é fundamental em muitas áreas da física, como a teoria quântica de campos, onde partículas podem ser modeladas como osciladores.

Essa aproximação parabólica simplifica muitos cálculos e fornece insights valiosos sobre o comportamento das partículas em sistemas físicos. No entanto, é importante lembrar que essa é uma aproximação válida apenas nas proximidades do mínimo local não é precisa em escalas maiores.

## 2.3 OSCILADOR HARMÔNICO QUÂNTICO

A essência do problema quântico está centrada na resolução da equação de Schrödinger em relação a um potencial específico, que ao resolver essa equação para um potencial específico, obtemos informações sobre os níveis de energia permitidos e as funções de onda associadas a um sistema quântico.

Por exemplo, ao aplicar a equação de Schrödinger a um potencial que se assemelha a um oscilador harmônico simples, podemos entender como os níveis de energia quantizados e as funções de onda associadas se relacionam com o comportamento de um sistema físico que oscila em torno de uma posição de equilíbrio.

### 2.3.1 Equação de Schrödinger

Na década de 1920, quando a física quântica ainda estava em fase de consolidação, o austríaco Erwin Schrödinger (1887-1961) emergiu como um dos principais pioneiros dessa inovadora área de estudo. Sua contribuição mais notável foi a equação de Schrödinger, uma formulação matemática fundamental que descreve a evolução temporal dos sistemas quânticos. Essa equação se tornou um pilar central na mecânica quântica, proporcionando uma base teórica crucial para a compreensão dos fenômenos atômicos e subatômicos.

A teoria de Schrödinger da mecânica quântica especifica quais leis do movimento ondulatório que as partículas de qualquer sistema microscópico obedecem. Para isto, cada sistema tem especificada a equação que controla o comportamento da função de onda, e também a relação entre esse comportamento e o comportamento da partícula. [6, p.11] A equação de Schrödinger independente do tempo tem a seguinte estrutura:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (10)$$

onde

- $\hbar$  é a constante reduzida de Planck,
- $m$  é a massa da partícula,
- $\psi(x)$  é a função de onda da partícula em relação à posição  $x$ ,
- $E$  é a energia total da partícula.
- $V(x)$  é o potencial associado à posição  $x$ ,

Na matemática pura, a equação de Schrödinger e suas variantes é uma das equações básicas estudadas no campo das equações diferenciais parciais e tem aplicações na geometria, na teoria espectral e de espalhamento e nos sistemas integráveis [7, p.22].

Assim, a resolução da equação de Schrödinger para diferentes potenciais permite explorar e compreender as propriedades quânticas dos sistemas, incluindo aqueles que exibem movimento oscilatório. Essa abordagem é fundamental para o entendimento da mecânica quântica e fornece uma base teórica para a interpretação de fenômenos observados em escalas subatômicas.

O problema quântico é resolver a equação de Schrödinger para o potencial:

$$V(x) = \frac{1}{2}Kx^2 \quad (11)$$

Costuma-se eliminar a constante de mola em favor da frequência clássica. Isolando  $K$  na equação (4), obtém-se:

$$K = m\omega^2 \quad (12)$$

Substituindo a equação (12) na equação (9), obtém-se:

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (13)$$

O potencial do oscilador harmônico quântico é um componente crucial em muitos problemas na mecânica quântica. Para um oscilador harmônico simples, o potencial é proporcional ao quadrado do deslocamento da partícula em relação à posição de equilíbrio.

Ao resolver a equação de Schrödinger para um potencial do oscilador harmônico, podemos determinar os estados quantizados de energia e as funções de onda associadas ao sistema, oferecendo uma descrição quântica detalhada do comportamento do oscilador harmônico.

Aplicando o potencial apresentado na equação (13) na equação (10), a equação de Schrödinger para um oscilador harmônico unidimensional é uma equação diferencial que descreve o comportamento quântico de uma partícula sujeita a um potencial harmônico. A forma da equação é dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) = E\psi(x) \quad (14)$$

Na literatura, você encontrará duas abordagens completamente diferentes desse problema. A primeira é uma solução de 'força bruta' para a equação diferencial em que se usa o método de série de potências; a vantagem aqui é que a mesma estratégia pode ser aplicada para muitos outros potenciais [5, p.31].

### 2.3.2 Resolução pelo Método Analítico

Utilizando a equação de Schrödinger para o potencial do oscilador harmônico,  $V(x)$  obtém-se a equação onde a mesma será multiplicada por  $\frac{-2m}{\hbar}$ , resultando na seguinte equação:

$$\frac{d^2\Psi_x}{dx^2} - \frac{m^2\omega^2 x^2 \Psi_x}{\hbar^2} + \frac{2mE\Psi_x}{\hbar^2} = 0 \quad (15)$$

Colocando o fator  $\psi(x)$  em evidência:

$$\frac{d^2\Psi_x}{dx^2} + \Psi_x \left( -\frac{m^2\omega^2 x^2}{\hbar^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right) = 0 \quad (16)$$

Chamando:

$$\alpha^2 = \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}, \quad \gamma = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (17)$$

A equação ficará:

$$\frac{d^2\Psi_x}{dx^2} + \Psi_x (\gamma - \alpha^2 x^2) = 0 \quad (18)$$

Acrescentando uma nova variável adimensional :

$$x = \sqrt{\alpha} \xi \quad (19)$$

A função de onda  $\Psi_x$  descreve a partícula na posição  $x$ , enquanto  $\Psi_\xi$  refere-se à função de onda em termos da variável adimensional  $\xi$ .

Agora percebe-se que a função de  $\Psi_x$  deve também obedecer a mudança de variável para uma função  $\Psi_\xi$ . Para introduzir essa nova variável na equação 18, será utilizado a regra da cadeia, mas antes precisa-se obter a derivada da equação 19:

Seja a mudança de variável dada por:

$$x = \sqrt{\alpha} \xi \quad \Rightarrow \quad \xi = \frac{x}{\sqrt{\alpha}} \quad (20)$$

Aplicando a regra da cadeia para a função  $\psi_x(x) = \psi_\xi(\xi(x))$ , temos:

### Derivada de primeira ordem

$$\frac{d\psi_x}{dx} = \frac{d\psi_\xi}{d\xi} \cdot \frac{d\xi}{dx} = \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \frac{d\psi_\xi}{d\xi} \quad (21)$$

### Derivada de segunda ordem

$$\frac{d^2\psi_x}{dx^2} = \frac{d}{dx} \left( \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \frac{d\psi_\xi}{d\xi} \right) = \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \cdot \frac{d}{dx} \left( \frac{d\psi_\xi}{d\xi} \right) = \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \cdot \frac{d}{d\xi} \left( \frac{d\psi_\xi}{d\xi} \right) \cdot \frac{d\xi}{dx} \quad (22)$$

$$\frac{d^2\psi_x}{dx^2} = \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \cdot \frac{d^2\psi_\xi}{d\xi^2} \cdot \frac{1}{\sqrt{\alpha}} = \frac{1}{\alpha} \frac{d^2\psi_\xi}{d\xi^2} \quad (23)$$

### Substituição na equação original

Dada a equação:

$$\frac{d^2\psi_x}{dx^2} + \psi_x (\gamma - \alpha^2 x^2) = 0 \quad (24)$$

Substituímos  $\frac{d^2\psi_x}{dx^2} = \frac{1}{\alpha} \frac{d^2\psi_\xi}{d\xi^2}$  e  $x = \sqrt{\alpha}\xi \Rightarrow x^2 = \alpha\xi^2$ , resultando em:

$$\frac{1}{\alpha} \frac{d^2\psi_\xi}{d\xi^2} + \psi_x (\gamma - \alpha^3 \xi^2) = 0 \quad (25)$$

Multiplicando toda a equação por  $\alpha$ :

$$\frac{d^2\psi_\xi}{d\xi^2} + \psi_x (\alpha\gamma - \alpha^4 \xi^2) = 0 \quad (26)$$

### Redefinição de parâmetro

Definimos:

$$\beta = \alpha\gamma \quad (27)$$

Assim, a equação final fica:

$$\frac{d^2\psi_\xi}{d\xi^2} + \psi_x (\beta - \alpha^4 \xi^2) = 0 \quad (28)$$

O objetivo é resolver a Equação 27 e, durante esse processo, obter os valores 'permitidos' de  $\beta$  (e, conseqüentemente, de  $E$ ). Inicialmente, observe que para valores grandes de  $\xi$  (o que implica grandes valores de  $X$ ), o termo  $\xi^2$  domina completamente a constante  $\beta$  nesse regime. Podendo então assim aproximar :

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} \approx \xi^2 \psi \quad (29)$$

Tomando a solução e onde  $\lambda$  é um parâmetro

$$\psi_\xi \approx e^{-\lambda\xi^2} \quad (30)$$

Derivando a equação 28:

$$\psi' = -2\lambda\xi e^{-\lambda\xi^2} \quad (31)$$

$$\psi'' = 4\lambda^2\xi^2 e^{-\lambda\xi^2} - 2\lambda e^{-\lambda\xi^2} = (4\lambda^2\xi^2 - 2\lambda)e^{-\lambda\xi^2} \quad (32)$$

Aplicando a equação 29 e 31 na equação 27:

$$(4\lambda\xi^2 - 2\lambda + \beta - \xi^2)e^{-\lambda\xi^2} = 0 \quad (33)$$

No contexto da equação, temos o termo  $e^{-\lambda\xi^2}$  é diferente de zero para  $\xi$  e  $\lambda$ , com isso, podemos afirmar que a equação se reduz á:

$$(4\lambda\xi^2 - 2\lambda + \beta - \xi^2) = 0 \quad (34)$$

Dividindo toda a equação por  $4\xi^2$ :

$$\lambda^2 - \frac{2\lambda}{4\xi^2} + \frac{\beta}{4\xi^2} - \frac{1}{4} = 0 \quad (35)$$

Ao tomar  $\xi \rightarrow \infty$ , eliminamos os termos pequenos (os que contêm  $\frac{1}{\xi^2}$ ), permitindo que encontremos uma solução mais simples para  $\lambda$ . Isso é útil porque, em muitos problemas físicos, o comportamento assintótico (isto é, para valores muito grandes de  $\xi$ ) nos dá informações importantes sobre a natureza da solução.

$$\lambda^2 - \frac{1}{4} = 0 \quad (36)$$

A solução para  $\lambda$  é dada por:

$$\lambda = \pm \frac{1}{2}$$

Retornando à equação (29) para  $\lambda = \frac{1}{2}$ , a solução trivial para  $\psi_\xi$ . Onde o termo  $A$  é uma função de Hermite ( $H_\xi$ ), que possui uma forma funcional mais simples que a própria  $\psi_\xi$ .

$$\psi_\xi = H_\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (37)$$

Derivando  $\psi_\xi$ :

$$\psi'_\xi = H'_\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} - \xi H_\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = (H'_\xi - \xi H_\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (38)$$

Derivando novamente:

$$\psi''_{\xi} = H''_{\xi} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} - \xi H'_{\xi} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} - \xi H'_{\xi} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} - H_{\xi} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} + \xi^2 H_{\xi} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (39)$$

Colocando o fator  $e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ , em evidência:

$$\psi'' = \left( H''_{\xi} - 2\xi H'_{\xi} + H_{\xi}(\xi^2 - 1) \right) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (40)$$

Substituindo  $\psi_{\xi}$  e  $\psi''_{\xi}$  na equação 27.

$$\left( H''_{\xi} - 2H'_{\xi} + (\xi^2 - 1)H_{\xi} \right) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} + (\beta - \xi^2) H_{\xi} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = 0 \quad (41)$$

Colocando em evidência o termo  $e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ , simplificando os termos .

$$H''_{\xi} - 2\xi H'_{\xi} + (\beta - 1)H_{\xi} = 0 \quad (42)$$

Chamando de  $\beta - 1$  de  $2n$

$$H''_{\xi} - 2\xi H'_{\xi} + 2nH_{\xi} = 0 \quad (43)$$

A equação 42 remete a equação de Hermite, onde  $H_{\xi}$  são os polinômios de Hermite e a busca para a solução da equação em forma de série de potências em termos de  $\xi$ .

### 2.3.2.1 Solução por séries de potência

As séries de potências são muito semelhantes aos polinômios e podem ser tratadas como funções polinomiais. Estas, por sua vez, são de grande importância para a representação de funções mais complexas, por sua simplicidade algébrica, analítica e gráfica [8, p.10]. Tomando como Solução:

$$H_{\xi} = \sum_{P=0}^{\infty} a_P \xi^P \quad (44)$$

Derivando os termos até a segunda derivada:

$$H'_{\xi} = \sum_{P=1}^{\infty} P a_P \xi^{P-1} \quad (45)$$

$$H''_{\xi} = \sum_{P=2}^{\infty} P(P-1) a_P \xi^{P-2} \quad (46)$$

Fazendo  $P = P + 2$  e substituindo na equação 45.

$$H''_{\xi} = \sum_{P=0}^{\infty} (P+1)(P+2) a_{P+2} \xi^P \quad (47)$$

Aplicando as equações 43, 44 e 46 na equação 42:

$$\sum_{P=0}^{\infty} (P+1)(P+2)a_{P+2}\xi^P - 2\xi \sum_{P=0}^{\infty} Pa_P\xi^{P-1} + 2n \sum_{P=0}^{\infty} a_P\xi^P = 0 \quad (48)$$

Colocando o termo em evidência  $\xi^P$ :

$$\sum_{P=0}^{\infty} ((P+1)(P+2)a_{P+2} - 2Pa_P + 2na_P)\xi^P = 0 \quad (49)$$

Como qualquer número diferente de zero elevado a qualquer potência continua sendo um número diferente de zero, temos que  $\xi^P \neq 0$ . Ou seja, qualquer coisa elevada a um número real continua existindo (exceto quando  $\xi = 0$ , mas não está sendo considerando esse caso). Portanto, para que a equação seja verdadeira, o outro fator deve ser zero:

$$(P+1)(P+2)a_{P+2} - 2Pa_P + 2na_P = 0 \quad (50)$$

Colocando  $a_P$  em evidência e isolando  $a_{P+2}$ , obtém a seguinte relação de recorrência para os coeficientes de  $a_{P+2}$ .

$$a_{P+2} = \frac{2(P-n)}{(P+1)(P+2)}a_P \quad (51)$$

Essa equação (50) diz como os coeficientes  $a_{P+2}$  estão relacionados entre si. Ao resolver essa relação de recorrência, podemos determinar os valores específicos e assim, encontrar a solução da equação diferencial em forma de série de potências. Soluções completa fica descrita como: Soluções completas fica descrita como:

$$H_\xi = H_{\xi_{\text{par}}} + H_{\xi_{\text{ímpar}}} \quad (52)$$

No qual,  $H_{\xi_{\text{par}}}$  e  $H_{\xi_{\text{ímpar}}}$  são atribuídos valores de  $a_P$ . Inicialmente, será calculado  $H_{\xi_{\text{par}}}$ .

Para  $H_{\xi_{\text{par}}}$  :

$$P = 0$$

$$a_2 = \frac{2(0-n)}{(0+1)(0+2)}a_0 = -na_0$$

$$P = 2$$

$$a_4 = \frac{2(2-n)}{(2+1)(2+2)}a_2 = \frac{-2n(n-2)}{4!}a_0$$

$$P = 4$$

$$a_6 = \frac{2(4-n)}{(4+1)(4+2)}a_4 = \frac{-2^3n(n-2)(n-4)}{6!}a_0$$

$$P = 6$$

$$a_8 = \frac{2(6-n)}{(6+1)(6+2)}a_6 = \frac{-2^4n(n-2)(n-4)(n-6)}{8!}a_0$$

No caso geral para os coeficientes pares  $k \geq 2$  :

$$a_{2k} = \frac{-2^k n a_0}{(2k)!} \prod_{l=1}^{k-1} (2l - 1) \quad (53)$$

Para os termos ímpares  $k \geq 1$  os cálculos de atribuição dos valores pares serão omitidos levando logo a equação geral dos termos  $H_{\xi_{\text{ímpar}}}$

$$a_{2k+1} = \frac{a_1}{(2k+1)!} \prod_{l=1}^k (4l - 2n - 1) \quad (54)$$

A solução da Equação Diferencial Ordinária (EDO) de Hermite é frequentemente buscada na forma de uma série de potências. Para a EDO de Hermite:

$$H_{\xi} = \sum_{P=0}^{\infty} a_P \xi^P = a_0 + a_1 \xi + a_2 \xi^2 + a_3 \xi^3 + \dots + a_n \xi^n \quad (55)$$

Dividindo a série em dois grupos, correspondentes aos termos pares e ímpares, temos:

$$H_{\xi} = \sum_{k=0}^{\infty} a_{2k} \xi^{2k} + \sum_{k=0}^{\infty} a_{2k+1} \xi^{2k+1}. \quad (56)$$

Prosseguindo, substituímos as expressões obtidas para os coeficientes  $a_{2k}$  e  $a_{2k+1}$ :

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_{2k} \xi^{2k} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{-2^k n a_0}{(2k)!} \prod_{l=1}^{k-1} (2l - 1) \xi^{2k}, \quad (57)$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_{2k+1} \xi^{2k+1} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a_1}{(2k+1)!} \prod_{l=1}^k (4l - 2n - 1) \xi^{2k+1}. \quad (58)$$

Combinando esses resultados, temos a solução geral da série de Hermite, onde os termos pares e ímpares são determinados de maneira independente. Essa abordagem destaca a simetria das soluções em relação à EDO de Hermite.

$$H_{\xi} = \sum_{P=0}^{\infty} a_P \xi^P = \left( a_0 + a_2 \xi^2 + a_4 \xi^4 + a_6 \xi^6 + \dots \right) \left( a_1 \xi + a_3 \xi^3 + a_5 \xi^5 + a_7 \xi^7 + \dots \right) \quad (59)$$

Prosseguindo com a substituição dos coeficientes, obtemos:

$$H_{\xi_{\text{par}}} = 1 - \frac{2n\xi^2}{2!} + \frac{2^2 n(n-2)\xi^4}{4!} - \frac{2^3 n(2-n)(4-n)\xi^6}{6!} + \dots \quad (60)$$

$$H_{\xi_{\text{ímpar}}} = \xi - \frac{2(n-1)\xi^3}{3!} + \frac{2^2(1-n)(3-n)\xi^5}{5!} - \frac{2^3(n-1)(n-3)(n-5)\xi^7}{7!} + \dots \quad (61)$$

Dado então que a solução geral dos polinômios de Hermite é:

$$H_{\xi_{\text{par}}} = 1 - \frac{2n\xi^2}{2!} + \frac{2^2 n(n-2)\xi^4}{4!} - \frac{2^3 n(2-n)(4-n)\xi^6}{6!} + \dots \quad (62)$$

$$H_{\xi_{\text{ímpar}}} = \xi - \frac{2(n-1)\xi^3}{3!} + \frac{2^2(1-n)(3-n)\xi^5}{5!} - \frac{2^3(n-1)(n-3)(n-5)\xi^7}{7!} + \dots \quad (63)$$

Atribuindo valores específicos para  $n$ , obtemos:

$$\text{Para } n = 0, \text{ temos } H_0(\xi) = \frac{2^0}{a_0} H_{\xi_{\text{par}}} = 1$$

$$\text{Para } n = 1, \text{ temos } H_1(\xi) = \frac{2^1}{1} H_{\xi_{\text{ímpar}}} = 2\xi$$

$$\text{Para } n = 2, \text{ temos } H_2(\xi) = \frac{2^2}{a_2} H_{\xi_{\text{par}}} = 4\xi^2 - 2$$

$$\text{Para } n = 3, \text{ temos } H_3(\xi) = \frac{2^3}{a_3} H_{\xi_{\text{ímpar}}} = 8\xi^3 - 12\xi$$

Onde  $H_n(\xi)$  são solução da equação (42). Em geral,  $H_n(\xi)$  será um polinômio de grau  $n$  em  $\xi$ , envolvendo somente potências pares, se  $n$  for um número inteiro par, e somente potências ímpares, se  $n$  for um número inteiro ímpar. Ainda por si, as resoluções apresentadas até o momento ainda não satisfazem o desejo de obter a solução para a equação de Schrödinger para o oscilador harmônico dada por funções de onda Hermite.

### 2.3.2.2 Auto energias do Oscilador Harmônico Quântico

Utilizando a equação (17), (26) e a relação  $2n = \beta - 1$  apresentada, obtém-se a seguinte equação:

$$2n = \frac{\gamma}{1} - 1 \quad (64)$$

Substituindo a relação de  $\gamma$  apresentado na equação 17:

$$2n = \frac{2mE}{\hbar^2} \cdot \frac{\hbar}{m\omega} - 1 = \frac{2E}{\hbar\omega} - 1 \quad (65)$$

De uma forma mais geral, as energias possíveis do oscilador harmônico quântico em função do número  $n$ :

$$2n = \frac{2mE}{\hbar^2} \cdot \frac{\hbar}{m\omega} - 1 = \frac{2E}{\hbar\omega} - 1 \quad (66)$$

### 2.3.2.3 Autofunções do Oscilador Harmônico Quântico

A constante de normalização na expressão da autofunção do oscilador harmônico quântico surge do requisito de que a probabilidade total de encontrar a partícula em qualquer lugar ao longo do eixo deve ser igual a 1. Em outras palavras, a integral do módulo ao quadrado da função de onda sobre todo o espaço deve ser igual a 1.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\xi)|^2 d\xi = 1 \quad (67)$$

A função a ser normalizada:

$$\psi_\xi = C_n H_\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (68)$$

Isso representa  $A$  como  $\frac{1}{\sqrt{\alpha}}$ , onde está irá facilitar os cálculos e  $\sqrt{\alpha}$  é apresentada no início da resolução, uma constante de normalização em função de  $\psi_\xi$ :

$$\psi_\xi = AC_n H_\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (69)$$

$$\psi_\xi = \frac{C_n}{\sqrt{\alpha}} H_\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (70)$$

Aplicando a função  $\psi_\xi$  e  $\overline{\psi_\xi}$  (complexo conjugado) na equação (66).

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{\overline{C_n}}{\sqrt{\alpha}} H_\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \right) \left( \frac{C_n}{\sqrt{\alpha}} H_\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \right) d\xi = 1 \quad (71)$$

$\overline{C_n}$ , seu complexo conjugado.

Contudo, deve-se observar a ortogonalidade dos polinômios de Hermite  $H_n(\xi)$ , os quais são ortogonais em relação à função  $e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$  no intervalo  $-\infty \leq \xi \leq +\infty$  e satisfazem a seguinte relação de ortogonalidade [9, p.05]:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_{n\xi} H_{m\xi} e^{-\xi^2} d\xi = \begin{cases} 0, & \text{se } n \neq m \\ 2^n \sqrt{\pi} n!, & \text{se } n = m \end{cases} \quad (72)$$

Onde  $n$  e  $m$  são números inteiros não negativos  $(0, 1, 2, \dots)$ . Fazendo  $n = m$ :

$$\frac{|C_n|^2}{\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} H_{n\xi} H_{m\xi} e^{-\xi^2} d\xi = 1 \quad (73)$$

Como o resultado pretendido é 1, a integral

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_{n\xi} H_{m\xi} e^{-\xi^2} d\xi = 1$$

equivale a

$$2^n n! \sqrt{\pi}, \quad \text{se } n = m.$$

Ficando assim:

$$\frac{C_n^2}{\alpha} (2^n n! \sqrt{\pi}) = 1 \quad (74)$$

Isolando  $C_n$  e substituindo  $\alpha$ , obtém-se a seguinte equação:

$$C_n = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \quad (75)$$

Após todo o trabalho árduo encontrou-se a constante de normalização para a “solução” das autos funções do Oscilador Harmônico Quântico simples.

$$\psi_{n\xi} = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (76)$$

### 2.3.3 Número Quântico $n$

O número  $n$  representa o **número quântico principal** no contexto do oscilador harmônico quântico. Ele indica o nível de energia da partícula confinada no potencial harmônico e assume valores inteiros não negativos:

$$n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (77)$$

Cada valor de  $n$  está associado a um estado quântico específico com uma energia dada por:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (78)$$

#### 2.3.3.1 Interpretação Física de $n$

- $n = 0$ : Estado fundamental (energia mínima possível, diferente de zero devido à energia de ponto zero).
- $n = 1, 2, 3, \dots$ : Estados excitados com energias quantizadas.

Cada estado  $n$  tem uma função de onda associada  $\psi_n(\xi)$ , que pode ser expressa em termos dos polinômios de Hermite  $H_n(\xi)$ :

Essas funções determinam as distribuições de probabilidade e os nós (pontos onde a função de onda se anula). O número de nós da função de onda  $\psi_n(\xi)$  é exatamente  $n$ . No estado fundamental ( $n = 0$ ), a função de onda não possui nós, enquanto para estados excitados ( $n \geq 1$ ), surgem regiões onde a amplitude se anula.

## 2.4 OSCILADOR ANARMÔNICO CLÁSSICO

Em sistemas físicos reais, como um sistema massa mola, o movimento harmônico simples é apenas uma solução aproximada, falhando em descrever um movimento cujo deslocamento não é suficientemente pequeno. Sendo que um deslocamento  $x$  é considerado

pequeno se os termos com ordem superior a  $x^3$  na expansão de Taylor são desprezíveis [10, p.01]

O oscilador anarmônico exibe uma relação não linear entre a força restauradora e o deslocamento. Isso significa que o comportamento do sistema é mais complexo, envolvendo uma função de potencial que inclui termos não lineares.

Para modelar um oscilador anarmônico, uma forma comum de potencial é o potencial de quarticidade, que é uma combinação de um termo harmônico e um termo não linear. Para estudar o caos conservativo em um oscilador anarmônico será utilizado o formalismo Hamiltoniano, para isto utilizaremos uma equação de energia potencial bastante simplificada. [10, p.01]

$$V(x) = \frac{Kx^2}{2} + \frac{bx^4}{24} \quad (79)$$

Aqui,  $K$  é a constante elástica que descreve a parte harmônica do sistema, e  $b$  é um parâmetro que determina a intensidade do termo não linear, caracterizando o comportamento anarmônico do sistema.

Substituindo o potencial na equação de movimento, obtemos a equação diferencial para o oscilador anarmônico:

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{dV(x)}{dx} \quad (80)$$

$$m \frac{d^2x}{dt^2} + Kx + \frac{bx^3}{6} = 0 \quad (81)$$

A equação 78 descreve o movimento de um sistema oscilante cujas oscilações não seguem a simples relação harmônica, levando a um comportamento mais complexo e, dependendo dos parâmetros, a fenômenos como distorções

## 2.5 OSCILADOR ANARMÔNICO QUÂNTICO

O estudo de movimentos anarmônicos é de grande interesse para a física. Tem grande aplicabilidade em física da matéria condensada, física nuclear e caos determinístico. [11, p.03 ]

Com isso, sistemas anarmônicos podem exibir comportamentos caóticos, nos quais pequenas variações nas condições iniciais levam a resultados drasticamente diferentes ao longo do tempo. Essa propriedade é explorada em aplicações práticas, como na teoria do caos, modelagem de sistemas complexos e previsão de fenômenos complexos.

O movimento de uma partícula em torno do seu ponto de equilíbrio, para pequenos deslocamentos, é harmônico. Entende-se por pequenos deslocamentos aqueles nos quais os termos iguais e maiores a  $x^3$ , na expansão em séries de Taylor da função Energia Potencial em torno desse ponto de equilíbrio, são desprezíveis. Como consequência disso, a força será uma função linear da posição.

Resolver esse problema geralmente envolve métodos matemáticos avançados, como séries de Fourier, solução de equações diferenciais não lineares ou técnicas de aproximação. A compreensão do oscilador anarmônico é fundamental em várias áreas da física, incluindo a descrição de vibrações moleculares, oscilações em sólidos cristalinos e fenômenos em sistemas quânticos.

Essas correções podem ser tratadas como perturbações no sistema, permitindo a aplicação de métodos perturbativos para encontrar soluções aproximadas.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_p \quad (82)$$

- $\hat{H}_0$ : é o hamiltoniano do oscilador harmônico.
- $\hat{H}_p$ : é o hamiltoniano da parte “perturbada”.

Como é possível escrever o hamiltoniano, a função de onda associada ao problema pode ser escrita como a função de onda do hamiltoniano do oscilador harmônico somada com o hamiltoniano da parte perturbada.

A função de onda total  $\Psi$  associada a esse problema pode ser escrita como a combinação linear da função de onda do oscilador harmônico  $\Psi_0$  e a função de onda da parte perturbada  $\Psi_p$ :

$$\Psi = \Psi_0 + \Psi_p \quad (83)$$

Esta abordagem permite separar o problema em dois: um onde o hamiltoniano é conhecido e outro onde a perturbação é tratada como uma correção ao hamiltoniano original. Isso simplifica a resolução do problema, permitindo o uso de técnicas perturbativas para encontrar soluções aproximadas.

Outro ponto crucial para a resolução está na energia total do sistema, que é dada pela soma da energia do oscilador harmônico simples e da energia de perturbação. Matematicamente, podemos escrever a energia total  $E_T$  como:

$$E_{\text{total}} = E_0 + E_p \quad (84)$$

- $E_0$ : energia do oscilador harmônico simples.
- $E_p$ : energia de perturbação.

A energia do oscilador harmônico simples,  $E_0$ , é determinada pelas soluções conhecidas desse sistema e apresentada no início deste trabalho de conclusão de curso.

Já a energia de perturbação,  $E_p$ , surge dos termos adicionais no hamiltoniano que representam a anarmonicidade do potencial. Esses termos podem ser tratados usando métodos perturbativos para encontrar uma expressão para  $E_t$  em termos dos parâmetros de perturbação e dos estados do oscilador harmônico, e essa energia pode ser retratada como uma integral sobre todo o espaço.

Assim, a energia total do sistema,  $E_{\text{total}}$ , é a soma dessas duas contribuições. Essa abordagem fornece uma maneira sistemática de calcular a energia total do oscilador anarmônico, incorporando tanto os efeitos do oscilador harmônico quanto da anarmonicidade do potencial.

$$E_T = E_0 + \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0 \hat{H} \psi_p dx \quad (85)$$

O potencial para o oscilador anarmônico é dado por:

$$V(x) = \frac{Kx^2}{2} + \frac{\gamma x^3}{6} + \frac{bx^4}{24} \quad (86)$$

Contudo, é importante notar que o termo cúbico ( $\frac{\gamma x^3}{6}$ ) no potencial pode ser ausente, dependendo da simetria do sistema, especialmente se o potencial for simétrico em torno de  $x = 0$ . Em muitos casos, especialmente quando o objetivo é simplificar a análise ou facilitar a plotagem dos gráficos, o termo cúbico é desconsiderado. Portanto, para facilitar a visualização e os cálculos, utilizaremos o potencial sem o termo cúbico, resultando na seguinte expressão:

$$V(x) = \frac{Kx^2}{2} + \frac{bx^4}{24} \quad (87)$$

Para o caso do oscilador anarmônico, o hamiltoniano  $H$  pode ser expresso como a soma do operador cinético e do potencial anarmônico:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}(x)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{Kx^2}{2} + \frac{bx^4}{24} \quad (88)$$

- $\mu$  é a massa do objeto,
- O termo  $\hat{H}_0 = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{Kx^2}{2}$  corresponde ao hamiltoniano do oscilador harmônico,
- $x$  é a coordenada do sistema,
- O termo  $H_{\text{anarmônico}} = \frac{bx^4}{24}$  corresponde ao hamiltoniano do oscilador anarmônico, com a remoção do termo cúbico,
- $\hat{T} = \frac{\hbar}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2}$  é o operador cinético do sistema.

A energia para o estado fundamental é dada por:

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \quad (89)$$

Com isso, a função de onda para o estado

$$\psi_{n\xi} = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_{n\xi} e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

irá aparecer novamente. Para a facilitação dos cálculos, o polinômio de Hermite é  $H_{n\xi} = 1$  e  $\xi$ ; lembrando que  $\omega = \sqrt{\frac{K}{m}}$ , fazendo uma mudança de variável, e  $\alpha = \left(\frac{K\mu}{\hbar}\right)^2$ , a nova equação que irá representar a função de onda é:

$$\psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} \quad (90)$$

Agora, ao usar-se essa nova função de onda na expressão para a energia de perturbação pode-se obter uma expressão mais simples para a energia do estado fundamental. Isso nos permite calcular a energia com mais facilidade, mesmo considerando a perturbação no potencial do oscilador anarmônico.

$$E_T = E_0 + \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}\right) \left(\frac{bx^4}{24}\right) \left(\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}\right) dx \quad (91)$$

Reorganizando :

$$E_T = E_0 + \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\alpha x^2}\right) \left(\frac{bx^4}{24}\right) dx \quad (92)$$

Analisando a equação (86), percebendo que o termo

$$\left(\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\alpha x^2}\right) \left(\frac{bx^4}{24}\right)$$

é uma função par e aplicando a regra de integração.

$$\frac{2b}{24} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 e^{-\alpha x^2} dx \quad (93)$$

Substituindo a integral conhecida, obtemos que a energia de perturbação  $E_P$  é dada por:

$$E_P = \frac{b}{32\alpha^2} \quad (94)$$

A equação representa a energia do estado fundamental do oscilador anarmônico quântico.

$$E_T = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar^2 b}{32k\mu} \quad (95)$$

## 2.6 INTRODUÇÃO AO WOLFRAM MATHEMATICA

O Mathematica é o um dos ambientes totalmente integrado do mundo para computação técnica. Lançado pela primeira vez em 1988, teve um efeito profundo na forma como os computadores são usados em muitos campos técnicos e outros. O principal avanço intelectual que tornou isso possível foi a invenção de um novo tipo de linguagem simbólica de computador que poderia, pela primeira vez, manipular uma ampla gama de objetos

envolvidos na computação técnica usando apenas um número relativamente pequeno de primitivas básicas [12, p.09]

Quando a Versão 1 do Mathematica foi lançada, o New York Times escreveu que “a importância do programa não pode ser negligenciado”, e a Business Week posteriormente classificou o Mathematica entre os dez novos produtos mais importantes do ano o Mathematica também foi aclamado pela comunidade técnica como uma grande revolução intelectual e prática [12,p.09].

No início, o impacto do Mathematica foi sentido principalmente nas ciências físicas, engenharia e matemática. Mas ao longo do anos, o Mathematica tornou-se importante em uma variedade notavelmente ampla de campos. O Mathematica é usado hoje em todas as ciências - físicas, biológicas, sociais e outras - e conta com muitos dos principais cientistas do mundo entre apoiadores entusiasmados.

Desempenhou um papel crucial em muitas descobertas importantes e foi a base para milhares de artigos técnicos. Na engenharia, o Mathematica tornou-se uma ferramenta padrão tanto para desenvolvimento quanto para produção, e atualmente, muitos dos novos produtos importantes do mundo dependem, em um estágio ou outro de seu design, do Mathematica. Em comércio, o Mathematica desempenhou um papel significativo no crescimento da modelagem financeira sofisticada, bem como sendo amplamente utilizado em muitos tipos de planejamento e análise geral.

O Mathematica é um software pioneiro que revolucionou a computação técnica desde seu lançamento em 1988. Ele se destaca por ser um ambiente integrado que combina diversas capacidades como cálculos numéricos, manipulação algébrica e visualização gráfica em uma única plataforma. Essa unificação permite que cientistas, engenheiros e outros profissionais trabalhem de forma mais eficiente e coesa, sem a necessidade de trocar constantemente entre diferentes ferramentas especializadas.

Além de seu impacto inicial nas ciências físicas, engenharia e matemática, o Mathematica expandiu seu alcance para outras áreas, como as ciências biológicas, sociais, e até o comércio. Ele se tornou essencial para modelagem financeira avançada, planejamento estratégico e análise de dados em um contexto comercial.

Em ciência da computação e desenvolvimento de software, o Mathematica é amplamente utilizado para pesquisa, prototipagem e como um ambiente de interface, refletindo sua versatilidade e adaptabilidade. O impacto do Mathematica não se limita ao seu uso como ferramenta de software; ele também transformou a maneira como a educação e a pesquisa são conduzidas.

No ensino, ele permite que estudantes visualizem conceitos abstratos e realizem experimentos que seriam difíceis de executar fisicamente, enriquecendo o processo de aprendizagem. Na pesquisa, o software tem sido fundamental para diversas descobertas, permitindo simulações e análises complexas que contribuíram para avanços significativos em um mundo cada vez mais orientado por dados e pela necessidade de soluções técnicas

Figura 3 – Comando Solve para equações algébricas

```
In[1]:= Solve[x^2 + 3 x + 2 == 0, x]  
|resolve
```

```
Out[1]= {{x -> -2}, {x -> -1}}
```

---

Fonte: Autor.

avançadas, o Mathematica continua a ser uma ferramenta crucial.

Seu desenvolvimento contínuo e adaptação a novas demandas refletem seu papel central na computação técnica moderna e sua capacidade de influenciar positivamente muitos campos do conhecimento.

Com uma comunidade dedicada de usuários e um histórico comprovado de inovação, o Mathematica permanece na vanguarda da revolução tecnológica, oferecendo soluções integradas para problemas complexos e desempenhando um papel indispensável em muitos setores.

### 2.6.1 Soluções simbólicas

Soluções simbólicas envolvem a manipulação de expressões matemáticas de forma exata, utilizando variáveis e símbolos ao invés de números específicos. Este tipo de solução é usado para encontrar fórmulas gerais que descrevem o comportamento de sistemas matemáticos ou físicos.

Por exemplo, ao resolver uma equação diferencial simbolicamente, o resultado será uma expressão que depende de parâmetros gerais, permitindo uma compreensão completa da relação entre as variáveis.

No Mathematica, soluções simbólicas podem ser obtidas utilizando funções como ‘Solve’ para equações algébricas ou ‘DSolve’ para equações diferenciais.

Essa função retorna uma solução exata para a equação quadrática, mostrando que  $(x = -1, -2)$  é a raiz da equação.

### 2.6.2 Soluções Numéricas

Soluções numéricas, por outro lado, envolvem a aproximação dos resultados através de métodos de cálculo numérico. Essas soluções são especialmente úteis quando as equações são muito complexas para serem resolvidas simbolicamente ou quando lidam com dados experimentais que não podem ser representados por expressões exatas.

Os métodos numéricos incluem aproximações, iterações e uso de algoritmos como o método de Newton-Raphson para encontrar raízes de equações ou métodos de integração numérica para resolver integrais complexas.

Exemplo de Solução Numérica no Mathematica: No Mathematica, soluções numéricas podem ser obtidas com funções como 'Nsolve' para equações algébricas ou 'NDSolve' para equações diferenciais. Por exemplo:

Figura 4 – NSolve para equações algébricas

```
In[2]:= NSolve[x^2 + 2 x + 1 == 0, x]
      |solução numérica

Out[2]= {{x -> -1.}, {x -> -1.}}
```

Fonte: Autor.

Esta função fornece uma solução numérica para a equação quadrática, retornando uma aproximação das raízes, se as raízes forem complexas ou se uma precisão específica for necessária.

### 2.6.3 Uso do Mathematica para soluções simbólicas e numéricas

O Mathematica é uma ferramenta poderosa tanto para soluções simbólicas quanto numéricas. Ele permite que os usuários escolham o método mais apropriado para o problema em questão e, frequentemente, facilita a combinação de ambos os métodos. [12, p. 09]

Por exemplo, um usuário pode primeiro resolver uma equação diferencial simbolicamente para entender a solução geral e, em seguida, usar métodos numéricos para avaliar essa solução para valores específicos de parâmetros.

Além disso, o Mathematica possui capacidades de visualização gráfica que permitem aos usuários plotar soluções simbólicas e numéricas, proporcionando uma melhor compreensão visual dos resultados. Isso é particularmente útil em campos como engenharia, física e matemática aplicada, onde a visualização pode revelar propriedades importantes dos modelos estudados. [12, p.10]

Portanto, o Mathematica é uma ferramenta extremamente versátil que oferece tanto soluções exatas (simbólicas) quanto aproximações (numéricas), adaptando-se a uma ampla gama de problemas científicos e técnicos.

Percebe-se que as soluções simbólicas e numéricas representam dois métodos distintos de resolver problemas matemáticos, cada um com suas próprias características e aplicações.

### 2.6.4 Principais Pontos a Destacar

Comportamento não-linear: Diferente do oscilador harmônico, onde as forças restauradoras são proporcionais ao deslocamento, no oscilador anarmônico, as forças restau-

radoras são mais complexas e dependem de termos de ordem superior.

Isso leva a soluções que não são simplesmente senóides, mas podem ter formas mais complexas e frequências de oscilação dependentes da amplitude. Estados quânticos:

Os autovalores obtidos (**vals**) representam as energias quantizadas dos primeiros estados do oscilador anarmônico. As autofunções (**funs**) correspondem às funções de onda associadas a esses estados. Devido ao termo, as energias dos estados não são espaçadas uniformemente como no caso do oscilador harmônico.

### 3 METODOLOGIA

A metodologia adotada neste estudo será fundamentada na utilização da ferramenta computacional Wolfram Mathematica, com o objetivo de explorar e comparar diferentes tipos de osciladores e seus comportamentos dinâmicos. A seguir, descreve-se o passo a passo da abordagem metodológica proposta.

1. Revisão Bibliográfica: O estudo iniciará com uma revisão bibliográfica detalhada sobre osciladores, abordando suas classificações e os métodos de resolução tradicionalmente empregados. Será dada especial atenção ao uso de ferramentas computacionais, com ênfase no Wolfram Mathematica, para a solução numérica de sistemas dinâmicos não-lineares, frequentemente encontrados no estudo de osciladores.

2. Modelagem Matemática: A modelagem matemática dos osciladores será a base para as simulações. Para os osciladores harmônicos quântico, serão consideradas equações diferenciais que descrevem movimentos com potenciais quadráticos. Para os oscilador anarmônico quântico, serão utilizados modelos não-lineares, abrangendo potenciais de ordem superior que provocam comportamentos dinâmicos complexos.

3. Simulação Numérica com Mathematica: Utilizando o Wolfram Mathematica, serão realizadas simulações numéricas para resolver as equações diferenciais associadas aos modelos propostos. As simulações envolverão: - Osciladores Harmônico quântico: Simulações que seguem a dinâmica de sistemas com potenciais quadráticos, onde soluções analíticas podem ser comparadas com as soluções numéricas. - Osciladores Anarmônicos quânticos: Modelagem e resolução numérica de sistemas com potenciais não-lineares, permitindo investigar fenômenos como o aumento de amplitude e a transição entre comportamentos periódicos e caóticos.

4. Análise Comparativa: A análise dos resultados será realizada de maneira detalhada, com o intuito de comparar as soluções obtidas de cada tipo de oscilador. Os aspectos a serem analisados incluem: - Precisão das Soluções: As soluções numéricas serão comparadas com as soluções analíticas para os osciladores harmônico quântico, avaliando a precisão dos métodos numéricos em relação às previsões teóricas. - Eficiência Computacional: Será avaliado o tempo de execução de cada método numérico e a capacidade de escalar as simulações para sistemas mais complexos, observando a eficiência em termos de uso de recursos computacionais.

5. Análise das Diferenças e Semelhanças entre Osciladores. A metodologia dedicará um capítulo específico para comparar as diferenças e semelhanças entre os osciladores. Serão destacadas levando em consideração a precisão, eficiência e comportamento físico dos sistemas analisados.

7. Conclusões: Ao final do estudo, será realizada uma síntese dos resultados obtidos, com a proposta de uma conclusão que aborde as principais descobertas e contribuições do uso de métodos numéricos avançados, como o Mathematica, na resolução de problemas

complexos. Além disso, será destacada a importância dessas abordagens para o avanço do conhecimento e suas aplicações práticas, especialmente nas áreas de engenharia e tecnologias emergentes.

### 3.1 METODOLOGIA DOS MODELOS MATEMÁTICOS

A metodologia aplicada neste estudo baseia-se no uso de modelos matemáticos para resolver problemas envolvendo, por meio de técnicas de discretização numérica e de autovalores. A seguir, apresentamos os principais passos para cada modelo.

Esta seção descreve a metodologia utilizada para estudar os sistemas de osciladores quânticos harmônicos e anarmônicos, com o objetivo de analisar suas soluções em diferentes configurações físicas. O estudo foi realizado através de modelos matemáticos baseados na equação de Schrödinger, com discretização espacial e utilização de técnicas de autovalores.

#### 3.1.1 Modelo para o Oscilador Harmônico Quântico

O oscilador harmônico quântico é um dos sistemas mais simples e fundamentais na mecânica quântica, sendo utilizado para modelar várias situações físicas, como partículas em potenciais quadráticos. A metodologia para resolução do problema de autovalores e autofunções foi construída sobre a equação de Schrödinger para um potencial harmônico.

#### 3.1.2 Modelagem Analítica do Oscilador Harmônico Quântico

A metodologia adotada neste estudo baseia-se na formulação analítica da equação de Schrödinger unidimensional para o oscilador harmônico quântico, resolvida em unidades naturais reduzidas ( $\hbar = 1$ ,  $m = 1$ ,  $\omega = 1$ ). Nessa configuração, a equação assume uma forma adimensional e suas soluções podem ser expressas por meio dos polinômios de Hermite  $H_n(\xi)$ .

onde  $\xi$  é a coordenada espacial adimensional. Essa expressão foi implementada computacionalmente utilizando o *software* Wolfram Mathematica para visualizar e analisar os primeiros estados estacionários do sistema.

#### 3.1.3 Procedimentos Metodológicos

Os principais passos para construção do modelo e geração dos gráficos foram:

1. **Definição da função de onda:** A função  $\psi_n(\xi)$  foi codificada com uso da função `HermiteH` do Mathematica, juntamente com o fator de normalização apropriado.
2. **Parametrização:** O número máximo de estados quânticos foi definido como  $n_{\max} = 4$ , e a variável  $\xi$  foi considerada no intervalo de  $[-4, 4]$ .

3. **Representação gráfica:** Utilizou-se a função `Plot` para gerar os gráficos das funções de onda, variando o número quântico  $n$ . Cada curva foi representada com uma cor distinta, extraída da paleta `ColorData[97]`.
4. **Estética e Legendas:** As cores foram nomeadas (*Azul, Verde, Amarelo, Vermelho, Roxo*) e associadas aos respectivos valores de  $n$  por meio da função `LineLegend`. Os gráficos foram configurados com rótulos de eixos, tamanho de fonte e estilos apropriados para melhor apresentação.

### 3.1.4 Análise Comparativa

A representação das funções de onda permitiu realizar uma análise qualitativa das propriedades do sistema:

- **Precisão das Soluções:** As funções obtidas correspondem às soluções analíticas exatas do oscilador harmônico quântico, garantindo total fidelidade teórica, sem introdução de erros numéricos.
- **Eficiência Computacional:** A implementação analítica no Mathematica é altamente eficiente, permitindo visualizações rápidas e precisas mesmo para múltiplos estados. Não há necessidade de métodos iterativos ou técnicas de discretização.

### 3.1.5 Diferenças e Semelhanças entre os Estados Quânticos

A partir da visualização das funções  $\psi_n(\xi)$ , observou-se:

- **Simetria:** Estados com  $n$  par apresentam simetria par, enquanto estados com  $n$  ímpar apresentam simetria ímpar.
- **Número de Nós:** O número de nós (pontos onde  $\psi_n(\xi) = 0$ ) aumenta com o número quântico  $n$ , sendo igual ao próprio  $n$ .
- **Espalhamento da função:** À medida que  $n$  aumenta, a função de onda se torna mais espalhada no espaço, indicando maior probabilidade de encontrar a partícula longe da origem.

### 3.1.6 Conclusões da Metodologia

Esta etapa do estudo evidenciou a relevância da modelagem analítica e da visualização gráfica na compreensão dos estados quânticos do oscilador harmônico. A clareza proporcionada pela visualização no Mathematica contribuiu significativamente para a análise e comparação dos comportamentos físicos dos diferentes níveis de energia.

Além disso, essa abordagem serve como base para futuras comparações com sistemas mais complexos, como o oscilador anarmônico, em que soluções numéricas serão necessárias.

A metodologia proposta reforça a importância do uso de ferramentas computacionais no ensino, pesquisa e aplicações práticas em Física, Engenharia e tecnologias emergentes.

### 3.1.7 Modelo para o Oscilador Anarmônico Quântico

O oscilador anarmônico é uma extensão do oscilador harmônico, com um potencial que não segue a Lei de Hooke, mas inclui um termo adicional de ordem superior, como o termo quartico  $x^4$ . Esse modelo é relevante para estudar sistemas com comportamentos não-lineares, comuns em várias áreas da física.

### 3.1.8 Procedimentos Metodológicos – Simulação Numérica do Oscilador Anarmônico Quântico

Para a análise do oscilador anarmônico quântico, foi adotada uma abordagem numérica utilizando o software *Wolfram Mathematica*, com o objetivo de obter os estados quânticos e os respectivos níveis de energia de um sistema unidimensional sujeito a um potencial não harmônico. A metodologia seguiu etapas sistemáticas, conforme descritas a seguir.

#### 1. Definição do Potencial Anarmônico

A dinâmica do sistema foi descrita por um potencial da forma:

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + bx^4$$

Esse potencial representa uma generalização do oscilador harmônico simples, incorporando um termo anarmônico quartico ( $x^4$ ) que introduz não linearidades na descrição do sistema. Essa modificação é particularmente relevante para o estudo de sistemas quânticos reais, como vibrações moleculares ou oscilações de partículas confinadas, onde o comportamento não é puramente harmônico.

Os parâmetros utilizados foram:

- $m = 1$ : massa da partícula em unidades arbitrárias;
- $\omega = 1$ : frequência natural do sistema;
- $b = 1$ : intensidade da anarmonicidade.

Esses valores foram escolhidos para facilitar a interpretação dos resultados, utilizando unidades adimensionais, comuns em problemas de mecânica quântica computacional.

#### 2. Domínio Espacial e Condições de Contorno

A equação de Schrödinger independente do tempo foi resolvida no intervalo espacial:

$$x \in [-2, 2]$$

Esse domínio garante que a função de onda esteja suficientemente confinada na região de influência do potencial. As condições de contorno adotadas foram do tipo *Dirichlet homogêneas*, ou seja:

$$\psi(-2) = \psi(2) = 0$$

Essa aproximação é válida em regiões onde o potencial é alto e a probabilidade de encontrar a partícula é desprezível.

### 3. Discretização Espacial e Resolução Numérica

A equação de Schrödinger foi resolvida numericamente com a função `NDEigensystem`, utilizando o método dos elementos finitos. Esse método permite o cálculo dos autovalores (níveis de energia) e autofunções (funções de onda) associados ao sistema.

O número de pontos na malha foi definido como 300, assegurando uma resolução suficiente para capturar os detalhes das autofunções. Foram obtidos os dois primeiros autovalores e autofunções:

```
NDEigensystem[... , {x, -2, 2}, 2]
```

### 4. Normalização das Autofunções

As autofunções foram normalizadas numericamente para satisfazer a condição:

$$\int_{-2}^2 |\psi_n(x)|^2 dx = 1$$

A normalização foi realizada com a função `NIntegrate`, garantindo a interpretação probabilística das funções de onda.

### 6. Justificativa da Abordagem

A resolução numérica foi adotada devido à ausência de solução analítica exata para o oscilador anarmônico com termo quartico. O uso de métodos computacionais baseados em elementos finitos oferece elevada precisão e permite a exploração de diferentes regimes do parâmetro  $\alpha$ .

Essa abordagem possibilita uma análise visual e quantitativa das modificações introduzidas pela anarmonicidade, contribuindo para a compreensão do comportamento quântico em sistemas reais. A comparação entre os estados obtidos e os do oscilador harmônico evidencia o desvio causado pelo potencial não linear.

## 4 RESULTADOS

### 4.1 GRÁFICOS DAS SOLUÇÕES QUÂNTICAS

Nesta seção, são apresentados os resultados da análise dos osciladores harmônico e anarmônico quânticos, com ênfase na comparação entre a solução algébrica e gráfica. A utilização de métodos numéricos foi fundamental para a exploração do comportamento desses sistemas, especialmente em relação à quantização da energia e à evolução temporal.

### 4.2 OSCILADOR HARMÔNICO QUÂNTICO

Os gráficos foram gerados para a função de onda  $\psi_n(\xi)$  utilizando os seguintes parâmetros para facilitar a resolução e a representação gráfica das funções de onda  $\psi_n(\xi)$ .

- **Constante reduzida de Planck:**  $\hbar = 1$
- **Massa da partícula:**  $m = 1$
- **Frequência angular:**  $\omega = 1$

A escolha de  $\hbar = 1$  corresponde ao uso de unidades naturais, muito comuns em estudos teóricos de mecânica quântica. Essa simplificação elimina a constante em várias expressões, como nos operadores de momento e na equação de Schrödinger, tornando os cálculos e os gráficos mais claros e diretos.

Ao definir  $m = 1$ , o termo cinético  $\frac{\hbar^2}{2m}$  no Hamiltoniano também se simplifica, além de padronizar a largura das funções de onda. Isso facilita a comparação entre diferentes estados e entre osciladores harmônicos e anarmônicos.

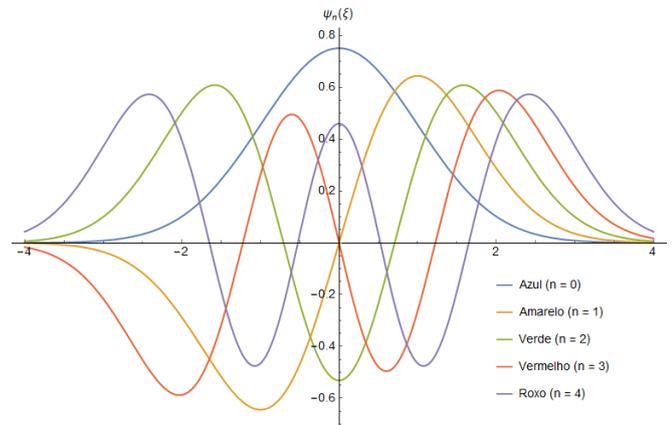
Finalmente, ao adotar  $\omega = 1$ , os níveis de energia do oscilador harmônico assumem a forma simples  $E_n = n + \frac{1}{2}$ , destacando a quantização equidistante característica desse sistema. Além disso, essa escolha padroniza a escala de energia e o espaçamento das oscilações nas soluções gráficas.

Portanto, essas simplificações não apenas reduzem a complexidade computacional como também permitem uma análise mais objetiva das propriedades físicas e matemáticas dos sistemas estudados. Todos os gráficos e simulações apresentados foram gerados utilizando o software *Wolfram Mathematica*.

#### 4.2.1 Representação Gráfica

O gráfico da função  $\psi_0(\xi)$  exibe uma curva suave, simétrica e campaniforme, típica de distribuições gaussianas. O eixo horizontal ( $\xi$ ) representa a coordenada espacial adimensional, enquanto o eixo vertical exibe a amplitude da função de onda.

Pode-se notar também um pico central, indicando a posição mais provável da partícula. Neste caso, o pico está localizado em  $\xi = 0$ , que é o ponto de equilíbrio do oscilador harmônico clássico. Nota-se também que a função de onda diminui exponencialmente à

Figura 5 – Função de Onda do estado  $n= 1, 2, 3$  e  $4$  do Oscilador Harmônico Quântico

Fonte: Autor.

medida que se afasta do pico central, graças ao termo exponencial que é responsável por esse decaimento, indicando a diminuição da probabilidade de encontrar a partícula em posições mais afastadas.

À medida que o número quântico  $n$  aumenta, observa-se o surgimento de nós — pontos onde a função de onda cruza o eixo horizontal, ou seja, onde a probabilidade de encontrar a partícula é nula. Isso reflete o aumento da energia do sistema e a complexidade crescente dos estados excitados. Além disso, as funções de onda tornam-se mais espalhadas, sugerindo que, em estados mais energéticos, a partícula tem maior chance de ser encontrada mais longe do ponto de equilíbrio, em consonância com o comportamento esperado também no regime clássico.

Já os parâmetros interferem somente na largura e a forma geral da função de onda. Valores diferentes desses parâmetros resultarão em diferentes perfis de probabilidade. O gráfico oferece uma visualização da distribuição de probabilidade associada ao segundo estado quantizado do oscilador harmônico quântico.

A interpretação probabilística das funções de onda é uma característica fundamental da mecânica quântica.

#### 4.2.2 Validação Teórica por Comparação com a Literatura

Os resultados obtidos a partir da implementação computacional do oscilador harmônico quântico coincidem qualitativamente e quantitativamente com os gráficos presentes na literatura clássica, como no livro de Griffiths.

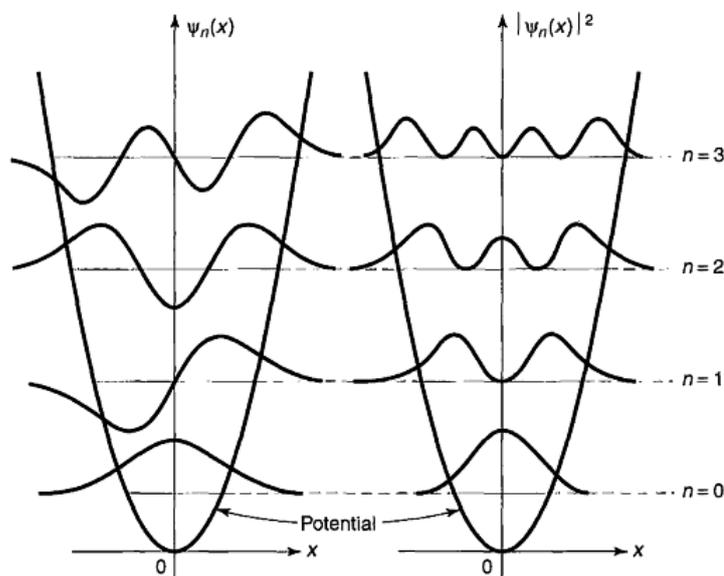
O código desenvolvido neste trabalho gerou gráficos das funções de onda normalizadas  $\psi_n(\xi)$  para os mesmos estados, apresentando as seguintes similaridades com a referência teórica:

- **Formato das Funções de Onda:** As curvas obtidas reproduzem com precisão o número de nós e a simetria das funções, confirmando que os estados pares

possuem simetria par, e os ímpares, simetria ímpar, exatamente como descrito na solução analítica.

- **Confinamento e Espalhamento:** Observa-se que, tal como na literatura, os estados de maior energia apresentam maior espalhamento espacial, refletindo o aumento da energia com o número quântico  $n$ .
- **Correspondência com os Polinômios de Hermite:** A forma oscilatória das funções está de acordo com os polinômios de Hermite, cujas raízes definem os nós das soluções  $\psi_n(x)$ , reforçando a fidelidade teórica do modelo computacional.

Figura 6 – Relação da função de onda com os níveis de energia da partícula



Fonte: [5]

### 4.2.3 Pontos Positivos da Implementação Computacional

O código implementado em *Wolfram Mathematica* apresentou várias vantagens em relação à construção e visualização das soluções:

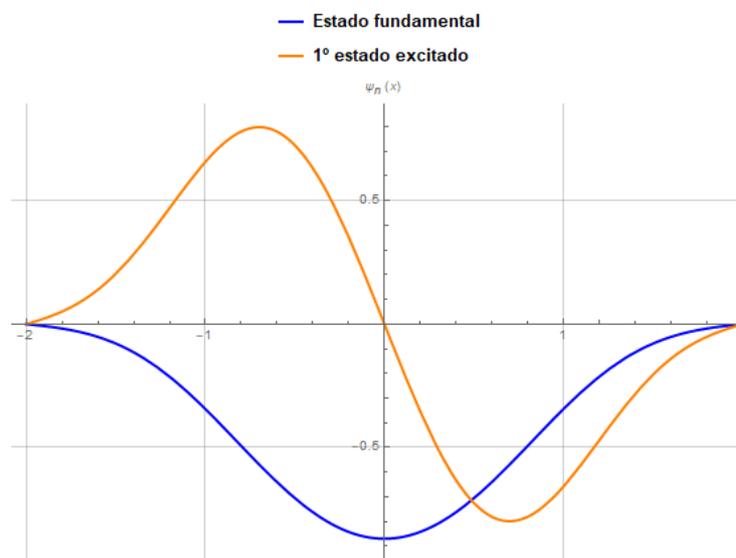
- **Rapidez e Precisão:** Utilizando as expressões analíticas e funções simbólicas do Mathematica, as soluções são geradas com extrema eficiência e exatidão, sem necessidade de aproximações numéricas.
- **Visualização Didática:** A construção gráfica clara, com cores e legendas, permite comparar visualmente os diferentes estados quânticos, servindo como ferramenta de apoio ao ensino de mecânica quântica.
- **Adaptabilidade:** A estrutura do código permite fácil adaptação para gerar densidades de probabilidade  $|\psi_n(x)|^2$ , ou para incluir perturbações e potenciais anarmônicos em análises futuras.

Portanto, os resultados obtidos corroboram a teoria bem estabelecida do oscilador harmônico quântico e demonstram a eficácia da ferramenta computacional na exploração e validação de sistemas físicos modelados por equações diferenciais em física quântica.

### 4.3 OSCILADOR ANARMÔNICO QUÂNTICO

Para o oscilador anarmônico quântico, com um potencial não linear, a solução analítica é significativamente mais complexa. Considerando um potencial do tipo  $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + bx^4$ , as soluções não podem ser expressas de forma simples. No entanto, a análise numérica através do `NDEigensystem` no *Mathematica* permite a resolução dessas equações diferenciais e a obtenção dos níveis de energia.

Figura 7 – Função de Onda do estado  $n=0$  e  $1$  do Oscilador Anarmônico Quântico



Fonte: Autor.

### 5. Representação Gráfica dos Resultados

As duas primeiras autofunções,  $\psi_0(x)$  e  $\psi_1(x)$ , foram representadas em um único gráfico, com cores distintas para facilitar a visualização:

- **Azul:** representa o **estado fundamental** ( $n = 0$ );
- **Laranja:** representa o **primeiro estado excitado** ( $n = 1$ ).

A escolha dessas cores segue convenções visuais clássicas e foi inspirada na diferenciação visual de estados quânticos. Os gráficos foram gerados com traçado espesso (`Thick`) para melhor legibilidade. Uma legenda foi incluída para identificar cada curva e os respectivos valores dos autovalores:

```
PlotLegends -> Placed[{"Estado fundamental (E = ...)",
```

"1º estado excitado (E = ...)", Above]

Essa representação permite observar as simetrias das autofunções, a presença de nós e a influência do termo quartico na forma das soluções. O comportamento dos níveis de energia do oscilador anarmônico, conforme mostrado na Figura 7, difere substancialmente do oscilador harmônico. A introdução dos termos  $x^3$  e  $x^4$  altera a regularidade dos espaçamentos entre os níveis de energia. Como esperado, os níveis de energia se tornam irregulares e a diferença entre os níveis aumenta conforme  $n$  cresce.

Os gráficos da função de onda para o oscilador anarmônico quântico também revelam comportamentos mais complexos em comparação ao oscilador harmônico. As distribuições probabilísticas se tornam mais espalhadas, com a presença de assimetrias e alterações na forma das curvas para níveis de energia mais elevados. A função de onda deixa de ser simétrica em torno da origem, como ocorre no oscilador harmônico.

Os resultados numéricos demonstram que, diferentemente do oscilador harmônico, os níveis de energia do sistema anarmônico não estão igualmente espaçados. Esse comportamento é uma consequência direta da presença do termo quartico ( $bx^4$ ), que altera a curvatura do potencial, tornando-o mais íngreme em regiões afastadas da origem. A seguir, são discutidos os principais aspectos observados e a eficácia do uso do *Mathematica* na análise do problema.

### 4.3.1 Forma das Autofunções

As autofunções  $\psi_0(x)$  e  $\psi_1(x)$  apresentaram comportamento compatível com o esperado para um sistema quântico em potencial simétrico: a função do estado fundamental é par e sem nós, enquanto a do primeiro estado excitado é ímpar e possui um nó central. No entanto, devido ao termo anarmônico, as funções de onda se comprimem mais nas regiões periféricas, refletindo o aumento da barreira potencial.

Os autovalores obtidos numericamente evidenciam que a diferença de energia entre os estados não segue mais uma relação linear como no caso harmônico.

## 4.4 COMPARAÇÃO ENTRE OS OSCILADORES HARMÔNICO E ANARMÔNICO QUÂNTICO

A análise comparativa entre o oscilador harmônico quântico e o oscilador anarmônico evidencia de forma clara os impactos da introdução de termos não-lineares no potencial sobre o comportamento físico do sistema. Essa comparação foi realizada tanto a partir das soluções numéricas obtidas via código no *Wolfram Mathematica* quanto por meio da visualização gráfica das autofunções e dos espectros de energia.

No caso do oscilador harmônico, os resultados obtidos confirmam a teoria: os níveis de energia são igualmente espaçados, conforme a relação  $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$ , e as

autofunções são simétricas, com formas bem definidas e regularidade no número de nós, que aumenta com o número quântico  $n$ . Os gráficos gerados mostram essa estrutura harmônica com clareza, com as autofunções estendendo-se suavemente e simetricamente ao redor da origem.

Em contraste, ao incluir o termo anarmônico  $bx^4$  no potencial, o comportamento do sistema é substancialmente modificado. O primeiro aspecto perceptível é o aumento dos autovalores em comparação com o caso harmônico. Para os mesmos valores de  $n$ , os níveis de energia são mais altos, e o espaçamento entre eles deixa de ser constante, aumentando com o valor de  $n$ . Essa característica reflete diretamente a distorção do poço de potencial: quanto maior a energia do estado, mais significativa se torna a contribuição do termo quartico.

Além disso, as autofunções para o oscilador anarmônico, plotadas nos mesmos intervalos espaciais, apresentam um perfil mais localizado no centro e um decaimento mais abrupto nas extremidades. Em estados de maior energia, nota-se também um aumento da assimetria e complexidade nas oscilações, com alterações visíveis em sua largura e amplitude. Tais características indicam que o potencial mais íngreme nas bordas restringe o espalhamento da função de onda, refletindo o confinamento mais intenso proporcionado pela anarmonicidade.

Graficamente, a diferenciação entre os dois modelos foi destacada com o uso de uma codificação de cores específica para cada nível de energia. Essa escolha metodológica permitiu uma leitura clara dos efeitos da anarmonicidade sobre a distribuição espacial das autofunções e facilitou a comparação entre os estados em ambos os modelos. As legendas incluídas reforçam essa distinção e tornam o material visual acessível e didático.

Essas observações confirmam que as soluções numéricas obtidas com o *Wolfram Mathematica* são não apenas consistentes com a teoria, mas também eficazes na representação de sistemas com comportamento não-linear. A ferramenta provou ser altamente precisa e adequada para simular a equação de Schrödinger com potenciais complexos, permitindo visualizar nuances que não são facilmente acessíveis por meio de soluções analíticas.

Por fim, essa comparação destaca a importância das abordagens computacionais no estudo da mecânica quântica moderna. Embora as soluções analíticas sejam fundamentais para a compreensão teórica dos sistemas físicos, as soluções numéricas e gráficas proporcionam uma exploração mais rica e intuitiva, sobretudo em casos onde a não-linearidade impede o uso direto de métodos clássicos. Assim, o uso do *Mathematica* neste trabalho não apenas facilitou a investigação do comportamento quântico anarmônico, como também demonstrou seu potencial pedagógico e investigativo.

## 5 CONCLUSÃO

Foram realizadas simulações para diferentes valores dos parâmetros. As soluções foram visualizadas utilizando gráficos. Os resultados das simulações numéricas foram comparados com as soluções analíticas para validar a precisão do modelo numérico.

A partir dos gráficos e das soluções obtidas, foi realizada uma análise qualitativa e quantitativa. A escolha do Wolfram Mathematica como ferramenta foi discutida, destacando suas capacidades avançadas de simbolismo e computação numérica, bem como suas funcionalidades de visualização que facilitaram a análise dos resultados.

Algumas limitações encontradas, como o tempo de processamento para simulações de alta precisão e a necessidade de ajustes manuais para melhorar a estabilidade numérica em algumas simulações. Na conclusão da metodologia, destacou-se a eficácia do uso do Wolfram Mathematica para a resolução e análise de osciladores harmônicos e anarmônicos, e como essa abordagem permitiu uma compreensão mais profunda dos comportamentos dinâmicos desses sistemas.

Com isso, os resultados obtidos para os osciladores harmônico e anarmônico quânticos confirmam as previsões teóricas e ilustram a importância das simulações numéricas no estudo de sistemas complexos. A análise gráfica e algébrica, aliada ao uso de métodos computacionais avançados como os disponíveis no Wolfram Mathematica, permitiu uma exploração detalhada das diferenças fundamentais entre os dois tipos de osciladores. O estudo de sistemas não-lineares como o oscilador anarmônico oferece uma perspectiva crucial para a compreensão de fenômenos físicos mais gerais e suas aplicações tecnológicas.

Conclui-se que além das simulações realizadas, é importante ressaltar o impacto do estudo na compreensão de fenômenos físicos mais complexos. Como os osciladores anarmônicos, em particular, abre portas para aplicações em áreas como a física de materiais e a engenharia, onde a não-linearidade dos sistemas é uma característica fundamental, sugestões para estudos futuros incluem a exploração de outros métodos numéricos e a aplicação a sistemas mais complexos com múltiplos graus de liberdade.

## REFERÊNCIAS

- [1] AULETT, Gennaro; FORTUNATO, Mauro; PARISI, Giorgio. *Quantum Mechanics*. Cambridge: 1<sup>a</sup> Edição, 2009.
- [2] OpenStax. *University Physics I: Mechanics, Sound, Oscillations, and Waves*. Rice University, 2016. Disponível em: <https://openstax.org/details/books/university-physics-volume-1>. Acessado em 19 de julho de 2024.
- [3] ALMEIDA, M. M.; GUIMARÃES, M. N.; PRUDENTE, F. V. Sobre o confinamento espacial de sistemas quânticos: o oscilador harmônico unidimensional e o átomo de hidrogênio. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 27, n. 3, p. 395–405, 2005. <https://doi.org/10.1590/S1806-11172005000300017>.
- [4] NOVAES, Marcel; STUDART, Nelson. *Mecânica Quântica Básica*. Editora Livraria da Física, 2016.
- [5] GRIFFITHS, David J. *Mecânica Quântica*. 2<sup>a</sup> ed. Pearson Education, 2011.
- [6] ALGOZINI JUNIOR, Airton. Diferentes métodos de resolução da equação de Schrödinger independente do tempo. 2019.
- [7] DE ALMEIDA, Juliana Nemezio; DE SOUZA, Tatiana Miguel Rodrigues. A equação de Schrödinger através das equações diferenciais parciais: uma revisão narrativa.
- [8] LIMA, Valéria Muniz. *Séries de potências: aspectos teóricos e aplicações*. 2011. 66 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Especialização) - Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Campo Mourão, 2011.
- [9] STARCH PERLIN, Alex. Polinômios Ortogonais Clássicos. *Anais do ENIC*, v. 1, n. 4, 2015. Disponível em: <https://anaisonline.uems.br/index.php/enic/article/view/1836>. Acesso em: 05 jan. 2025.
- [10] FERREIRA ROCHA, B. *Osciladores Anarmônicos e Caos*. 18 Novembro 2011. Disponível em: <https://xdocz.com.br/doc/osciladores-anarmonicos-e-caos-x8q6yjx40gnw>. Acesso em: 14 jan. 2025.

- 
- [11] DE AGUIAR, Marcus AM. Caos em sistemas clássicos conservativos. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 16, n. 1-4, p. 3-20, 1994.
- [12] WOLFRAM, S. *The Mathematica® Book*. 5. ed. Cambridge University Press, 2003.

## 1. ANEXO A- DESCRIÇÃO DO CÓDIGO PARA REPRESENTAÇÃO DAS FUNÇÕES DE ONDA DO OSCILADOR HARMÔNICO

Figura 8 – Código para o Oscilador Harmônico Quântico

```

n[-]:= (*Número máximo de estados quânticos*) nMax = 4;

(*Constantes naturais:hbar=1,m=1,omega=1->alpha=1*)
(*PsiB(xi) = (1/sqrt(2^n n! sqrt(pi))) * Hermite(xi) * Exp[-xi^2/2] *)

psi[n_, xi_] := (1/Sqrt[2^n * Factorial[n] * Sqrt[Pi]]) * HermiteH[n, xi] * Exp[-xi^2/2];

(*Definir as cores associadas corretamente aos níveis de energia*)
cores = {ColorData[97][1], ColorData[97][2], ColorData[97][3], ColorData[97][4], ColorData[97][5]};

(*Nomes das cores para os níveis de energia-Corrigindo a ordem de Verde e Amarelo*)
nomesDasCores = {"Azul", "Verde", "Amarelo", "Vermelho", "Roxo"};

(*Gerar gráficos com legendas de cor e nomes das cores*)
Show[
  mostra
  Table[Plot[psi[n, xi], {xi, -4, 4}, PlotStyle -> {cores[[n + 1]], Thick},
    {n, 0, nMax}],
  PlotLegends -> Placed[LineLegend[cores[[n + 1]], {nomesDasCores[[n + 1]]}], {Right, Top}],
  AxesLabel -> {"xi", Subscript[psi, n][xi]},
  AxesStyle -> Directive[Black, 14], LabelStyle -> {FontFamily -> "Helvetica", FontSize -> 14}, {n, 0, nMax}],
  PlotRange -> All, AxesLabel -> {"xi", Subscript[psi, n][xi]},
  AxesStyle -> Directive[Black, 14], LabelStyle -> {FontFamily -> "Helvetica", FontSize -> 14}, ImageSize -> Large,
  PlotLegends -> LineLegend[cores, Table[nomesDasCores[[n + 1]]], {n, 0, nMax}], PlotLabel -> None]

```

Fonte: Autor.

## INTRODUÇÃO

O oscilador harmônico quântico é um dos sistemas fundamentais da mecânica quântica. Suas soluções são bem conhecidas e dadas por funções de onda associadas aos autovalores de energia. No presente trabalho, utilizamos o *Wolfram Mathematica* para gerar e visualizar as funções de onda dos cinco primeiros estados quânticos ( $n = 0$  a  $n = 4$ ).

O código a seguir, desenvolvido na linguagem *Wolfram Mathematica*, tem como objetivo representar graficamente as funções de onda  $\psi_n(\xi)$  associadas aos primeiros estados quânticos do oscilador harmônico unidimensional.

### 1. Definição do Número Máximo de Estados Quânticos

```
nMax = 4;
```

Define-se o valor máximo de  $n$  como 4, ou seja, o código irá gerar gráficos para os estados  $n = 0$  até  $n = 4$ .

### 2. Expressão da Função de Onda

```
psi[n_, \[Xi]_] := (1/Sqrt[2^n * Factorial[n] * Sqrt[Pi]]) *
  HermiteH[n, \[Xi]] * Exp[-\[Xi]^2/2];
```

Essa função implementa a solução analítica da equação de Schrödinger para o oscilador harmônico, considerando as constantes naturais adimensionadas  $\hbar = 1$ ,  $m = 1$ ,  $\omega = 1$ , resultando em  $\alpha = 1$ . A função de onda depende dos polinômios de Hermite  $H_n(\xi)$  e do fator gaussiano  $\exp(-\xi^2/2)$ .

### 3. Atribuição de Cores aos Estados Quânticos

```
cores = {ColorData[97][1], ColorData[97][2], ColorData[97][3],
  ColorData[97][4], ColorData[97][5]};
nomesDasCores = {"Azul", "Verde", "Amarelo", "Vermelho", "Roxo"};
```

Cada função de onda é associada a uma cor distinta para facilitar a visualização dos diferentes estados. As cores são nomeadas conforme a ordem da lista.

### 4. Geração dos Gráficos

```
Show[Table[
  Plot[psi[n, \[Xi]], {\[Xi], -4, 4},
  PlotStyle -> {cores[[n + 1]], Thick},
  PlotLegends ->
  Placed[LineLegend[{cores[[n + 1]]},
    {nomesDasCores[[n + 1]] <> " (n = " <> ToString[n] <> ")"},
    {Right, Top}],
  AxesLabel -> {"\[Xi]", Subscript[\[Psi], n] [\[Xi]]},
  AxesStyle -> Directive[Black, 14],
  LabelStyle -> {FontFamily -> "Helvetica", FontSize -> 14}],
{n, 0, nMax}],
PlotRange -> All,
AxesLabel -> {"\[Xi]", Subscript[\[Psi], n] [\[Xi]]},
AxesStyle -> Directive[Black, 14],
LabelStyle -> {FontFamily -> "Helvetica", FontSize -> 14},
ImageSize -> Large,
PlotLegends ->
LineLegend[cores,
  Table[nomesDasCores[[n + 1]] <> " (n = " <> ToString[n] <> ")",
    {n, 0, nMax}]],
PlotLabel -> None]
```

Este trecho final do código gera todos os gráficos das funções de onda sobrepostas, com cores e legendas apropriadas, eixos rotulados e estilos visuais adequados. O intervalo para a variável  $\xi$  vai de -4 a 4, abrangendo a região mais relevante para a visualização das funções.

## .2 ANEXO B- DESCRIÇÃO DO CÓDIGO PARA REPRESENTAÇÃO DAS FUNÇÕES DE ONDA DO OSCILADOR ANARMÔNICO QUÂNTICO

Figura 9 – Código para o Oscilador Anarmônico Quântico

```

In[7]= m = 1; ω = 1; b = 1;
V[x_] := 1/2 m ω^2 x^2 + b x^4;

xMin = -2; xMax = 2; n = 2; pontos = 300;

{vals, funcs} = NDEigensystem[{-1/2 D[u[x], {x, 2}] + V[x] u[x], DirichletCondition[u[x] == 0, True]}, u[x], {x, xMin, xMax}, n,
  {autovalores e autofunções -> [derivada], [condição de Dirichlet], [verdadeiro]},
  Method -> {"SpatialDiscretization" -> {"FiniteElement", "MeshOptions" -> {"MaxCellMeasure" -> 1/pontos}}};

ψnorm[i_] := funcs[[i]] / Sqrt[NIntegrate[funcs[[i]]^2, {x, xMin, xMax}]];

Plot[{ψnorm[1], ψnorm[2]}, {x, xMin, xMax}, PlotStyle -> {{Blue, Thick}, {Orange, Thick}},
  {estilo do gráfico [azul [espesso] [laranja [espesso]}],
  PlotLegends -> Placed[{{Row[{"Estado fundamental (E = ", NumberForm[vals[1]], {4, 3}], " ")}, Row[{"1º estado excitado (E = ", NumberForm[vals[2]], {4, 3}], " ")}, Above],
  {legenda do gráfico -> [situado] [linha] [forma de número] [linha] [forma de número] [acima]},
  AxesLabel -> {"x", "\[i\ (\[SubscriptBox[\[psi], \ (n\)] (x) \)"}], PlotRange -> All, ImageSize -> Large, GridLines -> Automatic}
  {legenda dos eixos [intervalo do gráfico] [tudo] [tamanho da imagem] [grande] [grade de linhas] [automático]}

```

Fonte: Autor.

O código abaixo, escrito em *Wolfram Mathematica*, tem como objetivo resolver numericamente a equação de Schrödinger para um oscilador anarmônico unidimensional, utilizando o método dos elementos finitos.

## ANEXO – CÓDIGO PARA SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER PARA O OSCILADOR ANARMÔNICO QUÂNTICO

Este anexo apresenta o código desenvolvido em *Wolfram Mathematica* para a resolução da equação de Schrödinger unidimensional com um potencial anarmônico da forma:

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + bx^4$$

A seguir, cada bloco do código é acompanhado de sua respectiva descrição.

### 1. Definição dos Parâmetros do Sistema

Define-se a massa  $m = 1$ , a frequência natural  $\omega = 1$  e a constante de anarmonicidade  $b = 1$ . A função  $V[x]$  representa o potencial total do sistema.

```

m = 1; \[Omega] = 1; b = 1;
V[x_] := 1/2 m \[Omega]^2 x^2 + b x^4;

```

### 2. Domínio Espacial e Discretização

O intervalo espacial considerado é  $x \in [-2, 2]$ , buscando-se os dois primeiros autovalores e autofunções da equação de Schrödinger. O parâmetro `pontos` define a densidade da malha para a discretização.

```

xMin = -2; xMax = 2; n = 2; pontos = 300;

```

### 3. Solução Numérica com NDEigensystem

Utiliza-se o comando `NDEigensystem` com condições de contorno de Dirichlet homogêneas, retornando os autovalores `vals` e as autofunções `funcs`. O método de elementos finitos é especificado para discretização.

```
{vals, funcs} =
NDEigensystem[
  {-1/2 D[u[x], {x, 2}] + V[x] u[x],
   DirichletCondition[u[x] == 0, True]},
  u[x], {x, xMin, xMax}, n,
  Method -> {"SpatialDiscretization" -> {"FiniteElement",
    "MeshOptions" -> {"MaxCellMeasure" -> 1/pontos}}}]];
```

### 4. Normalização das Autofunções

Cada autofunção é normalizada de forma que a integral do módulo ao quadrado sobre todo o domínio seja igual a 1.

```
\[Psi]norm[i_] :=
funcs[[i]]/Sqrt[NIntegrate[funcs[[i]]^2, {x, xMin, xMax}]]];
```

### 5. Plotagem dos Dois Primeiros Estados

O gráfico exibe as duas primeiras autofunções normalizadas: o estado fundamental e o primeiro estado excitado, com suas respectivas energias.

```
Plot[{\[Psi]norm[1],\[Psi]norm[2]}, {x, xMin, xMax},
PlotStyle -> {{Blue, Thick}, {Orange, Thick}},
PlotLegends ->
  Placed[{Row[{"Estado fundamental (E = ",
    NumberForm[vals[[1]], {4, 3}], ")"}],
    Row[{"1º estado excitado (E = ",
    NumberForm[vals[[2]], {4, 3}], ")"}]}, Above],
AxesLabel -> {"x", "\!\(\*SubscriptBox[\(\[Psi]\), \(\n\)](x)\)"},
PlotRange -> All, ImageSize -> Large, GridLines -> Automatic]
```