POLINÔMIOS DE HERMITE E A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

Gabriel de Paula Silva (IC), Luana L. Silva Ribeiro(PQ)[1]

[1] *Universidade Federal de Itajubá.*

Palavras-chave: Equações diferenciais parciais, forma de Sturm Liouville, polinômios ortogonais.

Introdução

Uma Equação Diferencial Parcial (EDP) é uma equação que relaciona uma função de várias variáveis com suas derivadas parciais. De forma geral, as EDPs são utilizadas para modelar fenômenos contínuos que variam no tempo e no espaço, sendo muito aplicadas nas áreas da física, engenharia e finanças. Por exemplo, o modelo de Black–Scholes é um modelo descrito por uma EDP para precificação de ativos no mercado financeiro (HODGES; CARVERHILL, 1993).

O objetivo deste trabalho é estudar as soluções da *Equação de Schrödinger Unidimensional* dada pela fórmula:

(1) $$i\phi_t = \phi_{xx} - V(x)\phi,$$

com potencial

$$V(x) = x^2/4$$

que modela o oscilador harmônico quântico. Esse modelo descreve uma partícula sujeita a uma força restauradora proporcional ao seu deslocamento em relação à posição de equilíbrio. Veremos que a solução dessa EDP pode ser expressa em termos dos polinômios de Hermite. Os polinômios de Hermite além de compor a solução da equação estudada também possuem diversas aplicações, dentre elas podemos citar no controle ótimo de sistemas dinâmicos contínuos (DATTA et al., 1995).

Assim sendo, esta pesquisa se justifica pela aplicação tanto das EDPs quanto dos polinômios de Hermite em sistemas relacionados à engenharia e à física. Além disso, busca o aprendizado de novas ferramentas matemáticas que contribuem para o desenvolvimento do raciocínio analítico e da capacidade de modelagem de fenômenos complexos.

Metodologia

A pesquisa foi iniciada com o estudo bibliográfico da equação com base nos conceitos apresentados por Haberman (1987) sobre as aplicações elementares das EDPs. Após isso, foram realizados seminários semanais com a orientadora destinados à resolução da equação, iniciando com métodos matemáticos para a simplificação de uma EDP para uma Equação Diferencial Ordinária (EDO).

Em seguida, auxiliado pela referência (ARFKEN, 2013) foi aprofundado os conceitos relacionados à EDO de Hermite, o problema de Sturm Liouville e os polinômios ortogonais.

Nas reuniões semanais, discutimos como esses métodos auxiliam na resolução do problema por meio da aplicação direta da teoria detalhando todos os cálculos.

Além disso, durante toda a pesquisa utilizamos o LaTeX para registro dos cálculos e com isso aprender a usar essa ferramenta que é amplamente utilizada no meio acadêmico para a produção de textos científicos.

Resultados e discussão

Neste trabalho estamos interessados em encontrar a solução da a EDP dada em (1), que tem forma

$$\phi(t,x) = e^{iEt} f(x) .$$

Esta é uma técnica clássica chamada de *método da separação de variáveis*, ou seja, buscamos soluções que podem ser escritas como o produto de duas funções, uma que só depende do parâmetro *t* e a outra que só depende de *x*. Desta forma, o problema de resolver a EDP se reduz a resolver a equação diferencial ordinária

$$f'' + f(E - V) = 0.$$

Se reescrevermos a função como

$$f(x) = e^{-V(x)}y(x),$$

onde $V(x)$ é o potencial descrito na introdução, então podemos mostrar que $y(x)$ satisfaz a equação diferencial de segunda ordem:

$$y''(x) - xy' + \lambda y(x) = 0, \tag{2}$$

onde

$$\lambda = E - \frac{1}{2}.$$

Mostramos que se λ é um inteiro *n* esta equação possui uma solução polinomial chamada de *polinômio de Hermite de grau n*.

Em seguida, reescrevemos a equação diferencial (2) na forma auto-adjunta, também chamada de *forma de Sturm Liouville*, a saber, (aqui λ = *n*)

$$(y'\sigma(x))' + ny\sigma(x) = 0, \tag{3}$$

onde

$$\sigma(x) = e^{\frac{-x^2}{2}}, \tag{4}$$

é a função que quando multiplicamos a equação (2) eliminamos o termo da derivada primeira, denominada de *função peso*.

Os polinômios mônicos são aqueles cujo coeficiente do termo de maior grau é um. Os polinômios mônicos de Hermite de grau n são denotados por H_n e são solução da equação (3).

A seguir apresentamos alguma das propriedades satisfeitas por estes polinômios:

1ª Propriedade: Ortogonalidade

Essa propriedade diz que H_n, com $n \geq 0$, é uma sequência de polinômios ortogonais, isto é,

$$\langle H_n | H_m \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} H_n(x)H_m(x)\sigma(x)dx = 0,$$

se $m \neq n$.

Quando $m = n$,

$$\langle H_n | H_n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} H_n(x)H_n(x)\sigma(x)dx = n!\sqrt{2\pi}.$$

2ª Propriedade: Relação de Recorrência

$$H_{n+1}(x) - xH_n(x) + nH_{n-1}(x) = 0$$

Por meio desta propriedade é possível calcular os valores de H_n para $n = 1, 2, \ldots$.

3ª Propriedade: Fórmula de Rodrigues

$$H_n(x) = (-1)^n \frac{1}{\sigma(x)} \frac{d^n}{dx^n}(\sigma(x))$$

Semelhantemente à Relação de Recorrência, determina valores de H_n.

Todas essas propriedades foram obtidas a partir de manipulações na equação (3).

4ª Propriedade: Equação de Pearson

A função peso dada em (4) satisfaz a equação

$$\sigma'(x) = -x\sigma(x).$$

Conclusões

Portanto, por meio deste trabalho foi possível observar como os polinômios de Hermite podem ser utilizados para encontrar soluções da equação de Schrödinger Unidimensional. Ainda iremos explorar qual o impacto das propriedades dos polinômios de Hermite na solução da EDP estudada.

O método da separação de variáveis permitiu aprender uma forma de construir soluções da EDP, agregando novas técnicas com potencial de aplicação a outros tipos de equações e problemas.

Além disso, vale ressaltar que os resultados desta Iniciação Científica são parciais, visto que teve início em março de 2025 e terá conclusão em março de 2026. A análise das possíveis soluções da EDP e a construção das mesmas com o auxílio de softwares computacionais, como Python ou Wolfram Mathematica, ainda serão desenvolvidas.

Além disso, a aprendizagem do LaTeX contribuiu significativamente na organização da redação dos resultados deste trabalho.

Agradecimentos

Agradeço à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG) pelo financiamento, por meio da Bolsa de Desenvolvimento em C,T&I – Nível VI, vinculada ao projeto de pesquisa processo APQ-01574-24. A Unifei, pelo ambiente propício aos estudos.

Referências

ARFKEN, George B.; WEBER, Hans J. *Física matemática: métodos matemáticos para engenharia e física*. 7. ed. Rio de Janeiro: Elsevier, 2013.

DATTA, K. B.; MOHAN, B. M. Orthogonal functions in systems and control. Singapore: World Scientific, 1995. (Advanced Series in Electrical and Computer Engineering, v. 9). DOI: https://doi.org/10.1142/2476.

HABERMAN, Richard. *Elementary applied partial differential equations*. Englewood Cliffs: Prentice Hall, 1987. ISBN 0-13-252875-4.

HODGES, Stewart; CARVERHILL, Andrew. Quasi mean reversion in an efficient stock market: the characterisation of economic equilibria which support Black-Scholes option pricing. The Economic Journal, v. 103, n. 417, p. 395–405, 1993. DOI: https://doi.org/10.2307/2234778