EQUAÇÕES DIFERENCIAIS PARCIAIS – UMA ABORDAGEM INTRODUTÓRIA A MODELAGEM DE PONTOS-QUÂNTICOS

[1]Edeilson Cruz da Silva

[2]Israel da Silva Torres

RESUMO

O presente Trabalho de Conclusão de Curso (TCC) tem como objetivo explorar algumas aplicações de Equações Diferenciais Parciais (EDPs) na área da física, com foco especial no método de separação de variáveis e na utilização dos harmônicos esféricos e cilíndricos como ferramentas fundamentais nessa abordagem. Além disso, buscaremos justificar o estudo desses métodos, considerando sua relevância na modelagem de Sistemas Eletrônicos Quase-Unidimensionais (SEQ1D) – com foque particular no pontos-quânticos.

Palavras-chave: Equações Diferenciais Parciais, Separação de Variáveis, Método de Frobenius

ABSTRACT

This paper enphasizes on possible applications of Partidal Differential Equations (PDEs) in physics, whith focus on mathematical techiniques as methods of separation of variables as well as the use of spherical and cylindrical harmonics as fundamentais tools over those approaches. In addition, we will justify the study of these methods, considering their relevance in modeling such exquisite and complex systems.

Keywords: Partial Differential Equations, Method of Separation of Variables, Frobenius Method.

INTRODUÇÃO

Nos últimos anos, as equações diferenciais parciais têm desempenhado um papel fundamental em diversas áreas da ciência e engenharia, oferecendo ferramentas poderosas para descrever fenômenos complexos e intrincados. Em particular, a abordagem de separação de variáveis em equações diferenciais parciais tem se mostrado uma técnica valiosa para resolver problemas com geometrias simétricas e em sistemas físicos com comportamentos harmônicos. Neste Trabalho de Conclusão de Curso (TCC), exploraremos a aplicação dessa técnica em conjunção com harmônicos esféricos e cilíndricos, buscando compreender suas implicações e utilidades em problemas reais.

A motivação para este estudo é a crescente importância da modelagem de pontos quânticos, que são nanoestruturas com propriedades eletrônicas e ópticas únicas. Os pontos quânticos têm demonstrado grande potencial em diversas aplicações, como em dispositivos fotônicos, células solares, diagnóstico médico e aplicações biomédicas. Entender a dinâmica dos elétrons nesses sistemas é crucial para otimizar o desempenho e desenvolver novas tecnologias inovadoras.

Para abordar as equações diferenciais parciais, estudaremos a técnica de separação de variáveis, uma abordagem clássica e eficaz para resolver uma ampla gama de problemas físicos. A ideia central dessa técnica é decompor a solução da equação em um produto de funções de uma única variável, permitindo a resolução independente de cada uma delas. [1,3]

Além disso, investigaremos os harmônicos esféricos e cilíndricos, que desempenham um papel crucial em sistemas com simetria esférica e cilíndrica, respectivamente. Essas funções são fundamentais para representar soluções em coordenadas esféricas e cilíndricas e são de suma importância na descrição de muitos fenômenos naturais.

O objetivo principal deste trabalho é fornecer uma compreensão aprofundada das técnicas de resolução de equações diferenciais parciais com a abordagem de separação de variáveis, associadas ao estudo dos harmônicos esféricos e cilíndricos, e demonstrar como essas ferramentas podem ser aplicadas na modelagem precisa de pontos quânticos.

Ao avançarmos em nossa investigação, esperamos contribuir para a ampliação do conhecimento acadêmico nessa área, fornecendo insights importantes para cientistas, engenheiros e pesquisadores que buscam compreender e solucionar problemas complexos em diversos campos. [6]

Portanto, este TCC se destina a analisar as equações diferenciais parciais com enfoque na técnica de separação de variáveis, discutindo detalhadamente os harmônicos esféricos e cilíndricos e sua aplicação na modelagem de pontos quânticos. Com isso, esperamos contribuir para o avanço da ciência e tecnologia, impulsionando o desenvolvimento de novas soluções e inovações na área de nanotecnologia e materiais avançados.

1. EQUAÇÕES DIFERENCIAIS PARCIAIS

equações diferenciais parciais (EDPs) são equações que envolvem derivadas parciais de funções de várias variáveis. Elas são usadas para descrever fenômenos em várias áreas da matemática, física, engenharia e outras disciplinas científicas. Uma EDP pode ser classificada de acordo com sua ordem (maior derivada presente) e seu tipo (elíptica, parabólica ou hiperbólica). Os resultados apresentados nesta seção têm como principais referências [1], [3] e [4].

1.1 O Conceito de Equação Diferencial Parcial

Definição 1.1.1. Uma **Equação Diferencial (ED)** é uma equação que envolve uma ou mais variáveis dependentes e suas derivadas até uma determinada ordem.

Definição 1.1.2. Uma **Equação Diferencial Ordinária (EDO)** é uma Equação Diferencial em que sua variável dependente (ou suas variáveis dependentes) dependem de uma única variável.

Exemplo 1.1.1. Em circuitos elétricos, a equação que modela o sistema composto por somente um resistor e um indutor ligados em série, sendo L e R constantes conhecidas como indutância e resistência respectivamente, é

$$L\frac{\partial i}{\partial t} + Ri = E(t) \quad (1.1)$$

Note que, neste caso, temos como variável dependente i e como variável independente t. Logo, de acordo com a definição anterior, a equação (1.1) é um exemplo de Equação Diferencial Ordinária.

Definição 1.1.3. Uma **Equação Diferencial Parcial (EDP**) é uma Equação Diferencial que envolve uma (ou mais de uma) variável dependente de duas ou mais variáveis independentes.

Exemplo 1.1.2. A EDP conhecida como equação de Laplace, $\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} = 0$, é muito utilizada no estudo dos campos eletrostáticos, que visa descrever a função potencial num meio dielétrico sem cargas elétricas. Analisando esta equação, temos como variável dependente v e variável independente x e y. portanto a Equação de Laplace é um exemplo de Equação diferencial parcial.

Definição 1.1.4. A **ordem** de uma EDP é a ordem da derivada parcial de maior ordem presente na equação.

assim, uma Equação Diferencial ´Parcial de ordem k com uma variável dependente em n variáveis independentes $x_1, ..., x_n$, é uma expressão da forma

$$F\left(x_1, \dots, x_n, v, \frac{\partial v}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial v}{\partial x_\eta}, \frac{\partial^2 v}{\partial x_1^2}, \dots, \frac{\partial^2 v}{\partial x_1 \partial x_n}, \dots, \frac{\partial^k v}{\partial X_n^k}\right) = g\,(x_1, ..., x_n), \quad (1.2)$$

Em que $x = (x_1, ..., x_n), \in \Omega, \Omega \subset \mathbb{R}^n$ e $v: \Omega \to \mathbb{R}$ é a variável dependente.

1.2 Linearidade

Além da ordem, outra classificação importante das EDP's diz respeito à linearidade ou não da equação. Temos uma teoria matemática bem avançada em se tratando das resoluções das EDP's lineares, porém, a teoria que envolve a resolução das equações não lineares é bem mais complicada e menos precisa.

Definição 1.2.1. Chamamos de **parte principal** da Equação Diferencial Parcial a parte da equação que contém as derivadas de maior ordem.

Definição 1.2.2. Dizemos que a EDP (1.2) é **linear** se F é linear em relação a V e a todas as suas derivadas parciais. Caso contrário, a EDP é **não linear.**

Definição 1.2.3. Uma Equação Diferencial linear é dita homogênea quando a parcela que não possui a variável dependente é identicamente nula (g(x_1, ..., x_n) = 0 em (1.2), caso contrário diremos que a equação é **não homogênea.**

As Equações Diferenciais Parciais de segunda ordem merecem um destaque maior de vido a sua grande aplicabilidade em problemas físicos, por exemplo, em mecânica dos fluidos, movimentos ondulatórios e condução de calor. As equações que descrevem os exemplos citados, estão amparadas por uma teoria bem estruturada e bem desenvolvida com diversos métodos de resolução.

Consideremos a EDP linear de 2ª ordem nas variáveis independentes x, y e variável dependente $v = v\,(x, y)$, sobre o domínio $, \Omega \subset \mathbb{R}^2$, dada por

$$A_{vxx}+ B_{vxy}+C_{vyy}+D_{vx} ++E_{vy} + F_v + G = 0 \qquad (1.3)$$

em que os coeficientes $ABCDEF$ e G são funções reais que dependem das variáveis $x, y,$ definidas para todo (x, y). $\in \Omega$ Como a EDP é de segunda ordem, devemos ter

$$A^2\,(x, y) + B^2\,(x, y) + C^2 \neq 0$$

1.3 Problema de valor Inicial e de Contorno

As condições de contorno são essenciais o resolver Equações Diferenciais Parciais (EDPs) para determinar soluções válidas.

Definição 1.3.1. Um Problema de Valor Inicial (PVI), ou Problema de Cauchy, consiste em uma Equação Diferencial, juntamente com condições complementares impostas de maneira que, umas das variáveis independentes são fixadas em relação à variável dependente e a suas derivadas.

Exemplo 1.31. Analisando a EDP $\alpha^2 v_{xx} = v_{tt}$, note que sua solução depende do tempo t, com isso podemos dizer *na* solução $v\,(x, t)$, quando $t = 0$.

Matematicamente, procuramos uma solução que satisfaça a EDP com duas condições iniciais:

$$v\,(x, 0) = f(x),\ v_t(x, 0) = g(x),\ 0 < x < L.$$

Definição 1.32. Um Problema de Valores de Contorno (PVC), ou Problemas de fronteira, consiste em uma Equação Diferencial, juntamente com condições complementares impostas sobre o valor da solução e de suas derivadas no bordo ou fronteira da região $(\partial\Omega)$.

Exemplo 1.32. Tomando como referência a EDP utilizada no Exemplo (1.3.1) aplicada ao problema das cordas vibrantes, observamos que esta corda é fixa permanentemente ao eixo x em $x = 0$ e $x = L$. Portanto, temos como condições de contorno para este problema

$$v\,(0, t) = 0,\ v\,(L, \mathrm{t}) = 0,\ t \geq 0.$$

2. MÉTODO DE SEPARAÇÃO DE VARIÁVEIS

O método de separação de variáveis é uma técnica poderosa para resolver equações diferenciais parciais. A ideia fundamental é assumir que a solução pode ser escrita como o produto de funções que dependem apenas de uma única variável. Para a equação de Laplace, consideramos a seguinte forma da solução:

A equação de Laplace é dada por:

$$\nabla^2 V = 0$$

onde ∇^2 é o operador laplaciano, e v é o potencial elétrico. Esta equação expressa a ausência de fontes ou cargas elétricas no espaço.

Em duas dimensões

equação de Laplace, $\nabla^2 V = 0$, com $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ e $V = V(x, y, z)$ uma função bem comportada.

1) Em duas dimensões a equação de Laplace fica:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} = 0 \tag{2.1}$$

A fim de resolver está equação, tomaremos a função $V(x, y)$ separável, ou seja, iremos escrever $V\,(x, y) = X\,(x)\ Y\,(y)$, substituindo na equação de Laplace:

$$\frac{\partial^2 X(x)Y(y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 X(x)Y(y)}{\partial y^2} = 0$$

$$Y(y)\frac{\partial^2 x}{dx^2}(x) + X(x)\frac{\partial^2 y}{\partial y^x} = 0$$

Multiplicando por $X(x)Y(y)$, temos:

$$\frac{1}{X(x)}\frac{d^2X(x)}{dx^2} + \frac{1}{Y(y)}\frac{d^2Y(y)}{dy^2} = 0$$

Assim, o primeiro termo depende apenas da variável x e o segundo apenas da variável y. Como as variáveis são independentes a única forma da soma de suas variações ser nula, é se cada uma delas for constante e uma for a oposta da outra, sendo assim podemos escrever da seguinte forma:

$$\frac{1}{X(x)}\frac{d^2X(x)}{dx^2} = k^2 \tag{2.2}$$

e

$$\frac{1}{Y(Y)}\frac{\partial^2 Y(y)}{dy^2} = -k^2 = (ik)^2 \tag{2.3}$$

Dessa forma a EDP inicial ficou reduzida a duas EDO's (Equações acima), e serão resolvidas usando um método geral conhecido por método de Frobenius, a saber, "chutaremos" uma solução em série para a equação e ao final tentaremos interpretar qual função a série representa. Começando pela equação:

$$\frac{1}{X(x)}\frac{d^2X(x)}{dx^2} = k^2$$

$$\frac{d^2X(x)}{dx^2} = X(x)k^2$$

$$\frac{d^2X(x)}{dx^2} - k^2X(x) = 0$$

Essa é a equação de um oscilador hormônico unidimensional com frequência $\varpi^2 = -k^2$. Tomando $X(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$, temos:

$$\frac{d^2(\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n)}{dx^2} - k^2 \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = 0$$

$$\sum_{n=2}^{\infty} a_n n(n-1)\, x^{n-2} - k^2 \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = 0$$

Tomando *n'=n-2* no primeiro termo da equação acima, temos:

$$\sum_{n'=0}^{\infty} a_{n'} n(n'+2)(n'+1)\, x^{n'} - k^2 \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = 0$$

Renomeando n'=n (podemos fazer isso porque a variável n´ é nula).

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_{n+2}(n+2)(n+1) - k^2 \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = 0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} (a_{n+2}(n+2)(n+1) - k^2 a_n) x^n = 0$$

e, portanto:$(a_{n+2}(n+2)(n+1) - k^2 a_n) = 0$, daqui:

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = a_0 + a_1 x + \frac{k^2}{2} a_0 x^2 + \frac{k^3}{3!} a_1 x^3 + \frac{k^4}{4!} a_0 x^4 \frac{k^5}{5!} a_1 x^5 + \cdots$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = a_0 + \left(1 + \frac{k^2}{2} x^2 + \frac{k^4}{4!} x^4 + \cdots\right) + \frac{a_l}{k}\left(kx + \frac{k^3}{3!} x^3 + \frac{k^5}{5!} x^5 + \cdots\right)$$

(2.4)

3. HARMÔNICOS ESFÉRICOS E CILÍNDRICOS

A equação de Laplace em coordenadas esféricas é uma expressão matemática que descreve como um campo escalar se comporta em um espaço tridimensional em coordenadas esféricas. Ela é frequentemente utilizada em física e matemática para resolver problemas envolvendo simetria esférica, como na teoria eletromagnética, na teoria do potencial e em outros contextos.

Em coordenadas esféricas a equação de Laplace fica:

$$\nabla^2 V = \frac{1\partial}{r^2 \partial r}\left(r^2 \frac{\partial V}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta \frac{\partial V}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2 V}{\partial \phi^2} = 0 \qquad (3.5)$$

da mesma forma que antes, iremos supor que V= $V(r, \theta, \phi)$ é separável. Primeiramente, iremos separar apenas a parte que envolve p. Tomando V da seguinte forma: $V(r, \theta, \phi) = H\ (r, \theta)\ \ \mathbf{\Phi}\ (\phi)$, assim a equação de Laplace fica:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial H(r,\theta)\mathbf{\Phi}\ (\phi)}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial H(r,\theta)\mathbf{\Phi}\ (\phi)}{\partial\theta}\right)$$
$$+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\ \frac{\partial^2 H(r,\theta)\mathbf{\Phi}\ \ (\phi)}{\partial\phi^2}=0$$

$$\frac{\mathbf{\Phi}(\phi)}{r^2}\ \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial H(r,\theta)}{\partial r}\right)+\frac{\mathbf{\Phi}(\phi)}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial H(r,\theta)}{\partial\theta}\right)+\frac{H(r,\theta)}{r^2\sin^2\theta}\ \frac{\partial^2\mathbf{\Phi}\ \ (\phi)}{\partial\phi^2}=0$$

Multiplicando esta equação por $\frac{r^2\sin^2\theta}{H(r,\theta)\mathbf{\Phi}\ (\phi)}$, temos:

$$\frac{\sin^2\theta}{H(r,\theta)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial H(r,\theta)}{\partial r}\right)+\ \frac{\sin\theta}{H(r,\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial H(r,\theta)}{\partial\theta}\right)+\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{\Phi}\ (\phi)}\frac{d^2\mathbf{\Phi}\ (\phi)}{d\phi^2}=0$$

os dois primeiros termos dependem exclusivamente de r e θ e suas variações, enquanto o último termo depende de ϕ e suas variações. Assim, para que a soma seja nula, os termos só podem ser iguais a uma constante, aqui escolhida como m², dessa forma:

$$\frac{\sin^2\theta}{H(r,\theta)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial H(r,\theta)}{\partial r}\right)+\ \frac{\sin\theta}{H(r,\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial H(r,\theta)}{\partial\theta}\right)=m^2 \qquad (3.6)$$

e

$$\frac{1}{\mathbf{\Phi}\ (\phi)}\frac{d\mathbf{\Phi}\ (\phi)}{d\phi^2}=-m \qquad (3.7)$$

Que é a equação do oscilador harmônico resolvida anteriormente, e tem como solução

$$\mathbf{\Phi}\ (\phi)=Ae^{im\phi}+Be^{-im\phi}$$

Por sua vez, a equação:

$$\frac{\sin^2\theta}{H(r,\theta)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^{2\frac{\partial H(r,\theta)}{\partial r}}\right)+\frac{\sin\theta}{H(r,\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial H(r,\theta)}{\partial\theta}\right)=m^2$$

pode ser resolvida tomando $H\ (r,\theta)$ como separável, a saber, $H\ (r,\theta)=R\ (r)\ominus$ (θ). Dessa maneira:

$$\frac{\sin^2\theta}{R(r)\ominus(\theta)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)\ \ominus\ (\theta)}{\partial r}\right)+\frac{\sin\theta}{R(r)\ominus(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial R(r)\ominus(\theta)}{\partial\theta}\right)=m^2$$

$$\frac{\sin^2\theta\ominus(\theta)}{R(r)\ominus(\theta)}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)+\frac{\sin\theta\,R(r)}{\mathrm{R(r)}\ominus(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\ominus(\theta)}{d\theta}\right)=m^2$$

$$\frac{\sin^2\theta}{R(r)}\frac{d}{dr}\left(r^{2\frac{dR(r)}{dr}}\right)+\frac{\sin\theta}{\ominus(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\ominus(\theta)}{d\theta}\right)=m^2$$

Dividindo toda a equação por $\sin^2\theta$, temos

$$\frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)+\frac{1}{\sin\theta\ominus(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\ominus(\theta)}{d\theta}\right)-m^2\sin^2\theta=0$$

Aqui vemos que a variação e a dependência em *r* estão separadas da variação e da dependência em θ , dessa maneira, novamente, elas só podem ser iguais a uma constante, a saber $l(l+1)$, assim:

$$\frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)=l(l+1) \tag{3.8}$$

e

$$\frac{1}{\sin\theta\ominus(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\ominus(\theta)}{d\theta}\right)-\mathrm{m}\sin^2\theta=-l(l+1) \tag{3.9}$$

Resolvendo a primeira dessas formas equações, novamente supondo uma solução

série $R(r)=\sum_{n=0}^{\infty}a_nr^n$, temos:

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right) = l(l+1)R(r)$$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right) - l(l+1)\,R(r) = 0$$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\,\sum_{n=0}^{\infty} a_n r^n\right) - l(l+1)\sum_{n=0}^{\infty} a_n r^n = 0$$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\,\sum_{n=0}^{\infty} n a_n r^{n-1}\right) - l(l+1)\sum_{n=0}^{\infty} a_n r^n = 0$$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\,\sum_{n=0}^{\infty} n a_n r^{n+1}\right) - l(l+1)\sum_{n=0}^{\infty} a_n r^n = 0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}(n(n+1) - l(l+1))a_n r^n = 0$$

Daqui

$$n(n+1) - l(l+1) = 0$$

$$(n-l)(n+l+1) = 0$$

Logo $n = l$ ou $n = -l(l+1)$. e portanto:

$$\mathrm{R(r)} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^n = a_l r^l + a_{-l(l+1)} r^{-l(l+1)} = Ar^l + \frac{B}{r^{l+1}} \tag{3.10}$$

Novamente *A e B* são constantes a determinar pelas condições iniciais e de contorno.

Resolvendo a equação para a coordenada θ, a saber:

$$\frac{1}{\sin\theta\,\ominus(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\ominus(\theta)}{d\theta}\right) - \mathrm{m}\sin^2\theta = -l(l+1)$$

Essa é a equação de Legendre associada, iremos resolver apenas a equação de Legendre (quando $m^2 = 0$). Logo:

$$\frac{1}{\sin\theta\,\ominus(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\ominus(\theta)}{d\theta}\right) + l(l+1) = 0$$

Para resolver essa EDO, iremos tomar $\ominus(\theta) = y(x)$ e

$$X = \cos\theta$$

$$dx = -\sin\theta \, d\theta$$

$$\frac{d}{d\theta} = -\sin\theta \frac{d}{dx}$$

Logo a equação de Legendre fica:

$$\frac{1}{\sin\theta}\left(-\sin\theta\frac{d}{dx}\right)\left(\sin\theta\left(-\sin\theta\frac{d}{dx}y(x)\right)\right) + l(l+1)y(x) = 0$$

$$\frac{d}{dx}\left(\sin^2\theta\frac{d}{dx}y(x)\right) + l(l+1)y(x) = 0$$

$$\frac{d}{dx}\left((1-\cos^2\theta)\frac{d}{dx}y(x)\right) + l(l+1)y(x) = 0$$

$$\frac{d}{dx}\left((1-\cos^2\theta)\frac{d}{dx}y(x)\right) + l(l+1)y(x) = 0$$

$$\frac{d}{dx}\left((1-x^2)\frac{d}{dx}y(x)\right) + l(l+1)y(x) = 0$$

Chutando a solução em série: $y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+m}$, temos:

$$\frac{d}{dx}\left((1-x^2)\frac{d}{dx}\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+m}\right) + l(l+1)\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+m} = 0$$

$$-2x\,\frac{d}{dx}\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+m} + (1-x^2)\frac{d^2}{dx^2}\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+m} + l(l+1)\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+m} = 0$$

$$-2x\,\frac{d}{dx}\sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+m) x^{n+m-1} + (1-x^2)\frac{d^2}{dx^2}\sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+m)(n+m-1) x^{n+m-2}$$
$$+ l(l+1)\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+m} = 0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}(-2)\, a_n(n+m)x^{n+m-} + \sum_{n=0}^{\infty} a_n(n+m)(n+m-1)x^{n+m-2}$$
$$-\sum_{n=0}^{\infty} a_n(n+m)(n+m-1)x^{n+m} + l\,(l+1)\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+m} = 0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} +l(l+1) - 2(n+m) - (n+m)(n+m-1)x^{n+m}$$
$$+\sum_{n=0}^{\infty} a_n(n+m)(n+m-1)x^{n+m-2} = 0$$

no segundo somatório podemos tomar $n+m-2 = n' + m'$

$$\sum_{n=0}^{\infty}(l(l+1) - 2(n+m)(n+m)(n+m-1)a_n x^{n+m}$$
$$+\sum_{n=0}^{\infty}(n+m+2)(n+m+1)a_{n+m+2}x^{n+m} = 0$$

Daqui:

$$a_{n+m+2} \;=\; -\frac{l(l+1) - 2(n+m) - (n+m)(n+m+1)}{(n+m+2(n+m+1)}a_n$$

$$a_{n+2} \;=\; -\frac{(l+n+1)(l-n)}{(n+1)(n+2)}a_n$$

Se considerarmos $a_0 = 1$ e $a_1 = 0$, temos:

$$p_{n(x)} = \frac{1-l(l+1)}{2!}x^2 + \frac{(l-2)l(l+1)(l+3)}{4!}x^4 + \ldots \qquad (3.11)$$

Para $m = -1$, temos:

$$a_{n+2} = -\frac{(l+n+2)(l-n-1)}{(n+2)(n+3)} a_n$$

Se considerarmos $a_0 = 0$ e $a_1 = 1$, temos:

$$q_{n(x)} = x\frac{(l-1)(l+2)}{3!}x^3 + \frac{(l-3)(l-1)(l+2)(l+4)}{5!}x^5+\ldots \tag{3.12}$$

$p_{n(x)}$ e $q_{n(x)}$ podem ser escritos diretamente pela formula de Rodrigues, a saber:

$$p_{n(x)} = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n} \tag{3.13}$$

Conhecidos como polinômios de Legendre.

No caso da equação de Legendre associada, temos como solução os polinômios de Legendre associados.

$$p_n^m(x) = \frac{1}{2^n n!}(1-x^2)^{m/2}\frac{d^{m+n}}{dx^{m+n}}(x^2-1)^n \tag{3.14}$$

Em coordenadas cilíndricas

$\nabla^2 u = 0$, onde u é a função que queremos encontrar e ∇^2 é o operador laplaciano. As coordenadas cilíndricas são (r, θ, z), onde r é a distância radial, é o ângulo azimutal e z é a coordenada vertical.

A ideia do método de separação de variáveis é assumir que a solução pode ser escrita como o produto de três funções independentes, cada uma dependendo de uma única coordenada:

$$u\,(r,\theta,z) = R(r)\ominus\ (\theta)Z(z).$$

Substituindo isso na equação de Laplace, temos:

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r\frac{dR}{dr}\right) + \frac{1}{r^2\ominus}\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2} = 0. \tag{3.15}$$

Agora, vamos isolar as partes que dependem apenas de única variável:

1) A parte radical:

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{dR}{dr}\right) + \frac{1}{\ominus}\frac{1}{r^2}\frac{d^2\ominus}{d\theta^2} + \frac{1}{Z}\frac{1}{r^2\ominus}\frac{d^2Z}{dz^2} = 0.$$

Dividindo toda a equação por r^2, temos:

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{dR}{dr}\right) + \frac{1}{\Theta}\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + \frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2} = 0.$$

O primeiro termo depende apenas de r, o segundo depende apenas de θ, e o terceiro depende apenas de z. Seguindo os mesmos passos anteriores e dando a devida atenção às constantes de separação, a parte radial fica:

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{dR}{dr}\right) = -k_1^2.$$

Onde k_1 é uma constante de separação, e agora multiplicando ambos os membros por *r,* temos:

$$\frac{d}{dr}\left(r\frac{dR}{dr}\right) = -k_1^2 r.$$

Agora, expandindo a derivada e rearranjando os termos, temos:

$$r\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{dR}{dr} = -k_1^2 r. \tag{3.19}$$

Esta é uma equação diferencial ordinária de segunda ordem que precisa ser resolvida para *R(r)*. As soluções dependem dos valores específicos de k_1 e do tipo de geometria que você está considerando (cilindro finito, semi-infinito, etc.).

Geralmente, a solução completa para a equação de Laplace usando o método de separação de variáveis envolve combinar as soluções das partes radial, angular e vertical, respeitando as condições de contorno do problema em questão.

4. MODELAGEM DE PONTOS QUÂNTICOS

A modelagem de pontos quânticos é um campo da física e da engenharia de materiais que se concentra na compreensão e na previsão das propriedades de nanoestruturas semicondutoras, conhecidas como pontos quânticos. Essas estruturas têm dimensões extremamente pequenas, tipicamente na faixa de alguns nanômetros, o que permite que elas exibam propriedades quânticas distintas devido à sua natureza confinada. A modelagem teórica desses sistemas envolve o uso de equações diferenciais parciais, métodos de separação de variáveis e funções matemáticas como os harmônicos esféricos e cilíndricos para descrever e prever suas propriedades físicas**.**

No contexto da modelagem de pontos quânticos, as EDPs são usadas para descrever a distribuição espacial das funções de onda dos elétrons e buracos dentro da nanoestrutura semicondutora. Essas equações podem ser derivadas a partir da equação de Schrödinger, que governa o comportamento quântico de partículas. Os resultados apresentados nesta seção têm como principais referências [12], [16] e [18].

4.1 Equações diferenciais Parciais na Modelagem de Pontos Quânticos

Passo 1: Para descrever as propriedades dos elétrons e lacunas em pontos quânticos, é necessário resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo, que é uma equação diferencial parcial que descreve a evolução temporal de uma função de onda quântica. A equação de Schrödinger para um elétron em um ponto quântico é dada por:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(r,t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{(r)}\Psi(r,t)\right] \tag{4.20}$$

Passo 2: O método de separação de variáveis envolve a suposição de que a função de onda pode ser escrita como o produto de duas funções independentes: uma que depende apenas das coordenadas espaciais *r* e outra que depende apenas do tempo t

$$\Psi(r,t) = \psi(r).\phi(t)$$

Substituindo esta forma na equação de Schrödinger, obtemos:

$$i\hbar\psi(r)\frac{\partial\phi(t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r) + V_{(r)}\psi(r)\right]\phi(t)$$

Dividindo ambos os lados por $\psi(r).\phi(t)$

$$\frac{i\hbar}{\phi(t)}\frac{d\phi(t)}{dt} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m\psi(r)}\nabla^2\psi(r) + V_{(r)}\right]$$

As duas partes da equação acima dependem de diferentes variáveis. A parte da esquerda apenas do termo *t*, enquanto a parte da direita depende apenas das coordenadas espaciais *r*. como essas partes devem ser iguais para todas as posições e tempos, elas devem ser iguais a uma constante, que chamaremos de Energia Total *E*.

$$\frac{i\hbar}{\phi(t)}\frac{d\phi(t)}{dt} = E \tag{4.22}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m\psi(r)}\nabla^2\psi(r) + V_{(r)} = E \tag{4.23}$$

Passo 3: Solução das Equações: A equação (4.1) é uma equação diferencial ordinária para $\phi(t)$ cuja solução geral é:

$$\phi(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

A Equação 4.2 é uma equação diferencial para $\psi(r)$ que pode ser simplificada usando coordenadas esféricas ou cilíndricas, dependendo da simetria do potencial. Caso de coordenadas esféricas: suponhamos que o potencial seja simétrico em relação á origem, o que é verdade para muitos pontos quânticos. Podemos usar coordenadas esféricas (*r, θ*, ϕ).

$$\nabla^2\Psi(r) = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial \mathrm{r}}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} \tag{4.24}$$

Substituindo $\nabla^2\Psi(r)$ na Equação (4.20) e readaptando os termos, obtemos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{\partial\psi}{dr}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\psi}{d\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{d^2\psi}{d\phi^2}\right] + V_{(r)}\,\psi(r) = E\psi(r)$$

Separando as variáveis, assumimos que $\psi(r) = \mathrm{R}_{(r)}\ominus_{(\theta)}\Phi_{(\phi)}$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{\mathrm{R(r)}}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\mathrm{R(r)}}{dr}\right) + \frac{1}{\ominus_{(\theta)}\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\ominus}{d\theta}\right) + \frac{1}{\phi\sin^2\theta}\frac{d^2\psi}{d\phi^2}\right] + V_{(r)}\mathrm{R(r)}\ominus(\theta)\Phi(\phi)$$
$$= E\mathrm{R(r)}\ominus(\theta)\Phi(\phi).$$

Cada termo separado na equação acima deve ser uma constante para que a equação possa ser separada. Chamamos as constantes de separação de *ER*(*r)* para parte radial, $E\ominus(\theta)$ para a parte angular θ e $E\Phi(\phi)$para a parte angular ϕ.

A parte radial da equação resulta em uma equação diferencial para R(r)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\mathrm{R(r)}}{dr}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}(V(r) - Er)R(r)\right] = ER \tag{4.25}$$

A parte angular da equação é associada à separação das coordenadas angulares no qual teremos: $\ominus\ (\theta)\ e\ \Phi(\phi)$ e envolve os polinômios de Legendre (caso esférico) ou função de Bessel (caso cilíndrico). A equação é dada por:

$$\frac{1}{\ominus(\theta)\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(sin\theta\,\frac{d\ominus(\theta)}{d\theta}\right)+\frac{1}{\Phi(\phi)sin^2\theta}\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2}+l(l+1) = -\,E\ominus \qquad (4.26)$$

Nesta equação:

$l(l+1)$ é o termo angular, onde l é o número quântico orbital angular.

$\ominus\ (\theta)$ é a função associada às coordenadas angulares θ.

$\Phi(\phi)$ é a função associada às coordenadas angulares ϕ (não presente no caso de simetria esférica).

Solução geral:

$$\Psi(r,t) = \mathrm{R(r)}\ \ominus\ (\theta)\Phi(\phi)\ e^{-\frac{\mathrm{i}Et}{\hbar}} \qquad (4.27)$$

Neste ponto, a função radial R(r) e a parte angular $\ominus\ (\theta)\ e\ \Phi(\phi)$ devem ser encontradas através das da solução das equações diferenciais resultantes da separação. A energia total E é determinada pelas condições de contorno e pelo potencial V(r) do ponto quântico. Lembrando que a separação de variáveis simplifica a equação de Schrödinger tridimensional em equações diferenciais mais simples, mas a solução completa exige resolver cada parte da equação e combinar suas soluções, levando em consideração as condições físicas específicas do sistema de pontos quânticos em estudo.

Descrição teórica e previsão de Propriedades Físicas: A modelagem de pontos quânticos não se limita apenas à resolução de equações diferenciais, mas também envolve a consideração de condições de contorno apropriadas para a nanoestrutura específica em estudo. Através desses métodos, é possível prever propriedades físicas como níveis de energia discretos, espectros de absorção e emissão, transições eletrônicas, distribuições de densidade eletrônica e muito mais.

Teoria de Bandas: A modelagem começa com a teoria de bandas, que descreve um esquema dos níveis de energia eletrônicos em sólidos cristalinos. Nesse contexto, um ponto quântico é tratado como um sistema de baixa dimensionalidade, onde os elétrons estão confinados a uma certa região (contorno) da interface semicondutora, e possuem comportamento análogo ao de uma partícula dentro de poço (semi-esférico) de potencial infinito; resultando em níveis de energia discretos. A teoria de bandas fornece a estrutura inicial para a modelagem, mas não leva em consideração o efeito de confinamento quântico nas propriedades dos portadores de carga.

Confinamento Quântico: A propriedade central dos pontos quânticos é o confinamento quântico, que resulta em níveis de energia discretos. A separação de variáveis e o uso de funções especiais permitem calcular os níveis de energia permitidos para os elétrons confinados nesses pontos quânticos. Esses níveis discretos influenciam diretamente as propriedades ópticas e eletrônicas desses sistemas.

Interações Elétron-Elétron e Outros Efeitos: Além do confinamento quântico, outros efeitos, como interações elétron-elétron e a influência de campos elétricos externos, devem ser considerados na modelagem dos pontos quânticos. Esses efeitos podem complicar as equações diferenciais parciais e, muitas vezes, requerem abordagens numéricas avançadas para a resolução, e que mais condizem com um nível de pós-graduação; portanto, serão apenas mencionados neste trabalho.

Em resumo, a modelagem teórica de pontos quânticos envolve a resolução da equação de Schrödinger por meio de métodos de separação de variáveis, utilizando coordenadas esféricas ou cilíndricas quando apropriado. Os harmônicos esféricos e cilíndricos emergem como soluções fundamentais, permitindo a descrição das propriedades físicas dos pontos quânticos e a previsão de seus comportamentos quânticos distintos.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Ao longo deste trabalho, exploramos a importância e as aplicações das equações diferenciais parciais, destacando a eficácia da técnica de separação de variáveis para resolver problemas complexos em sistemas físicos com simetrias específicas. Além disso, investigamos os harmônicos esféricos e cilíndricos, fundamentais para representar soluções em coordenadas esféricas e cilíndricas, respectivamente.

A justificativa para esta pesquisa baseou-se na crescente relevância da modelagem de pontos quânticos e outros sistemas eletrônicos bidimensionais (SE2D) com propriedades singulares que têm mostrado potencial em diversas aplicações tecnológicas. Compreender a dinâmica dos elétrons nesses sistemas é por si só um exercício válido do ponto de vista teórico da física, cuja compreensão pode impactar diretamente na engenharia deles. Do ponto de vista experimental, algumas lacunas ainda são necessárias uma vez que tais teorias não explicam os resultados experimentais por completo, mas ainda assim, fomentam o terreno de novas propostas para a ainda crescente indústria dos semicondutores.

Através da análise de equações diferenciais parciais, enfatizamos a utilidade das técnicas matemáticas para resolver problemas físicos reais- e que têm aplicação direta na indústria. Essas técnicas se provaram eficientes e versáteis, permitindo uma melhor compreensão de sua utilidade prática para uma indústria. Coisa que raramente ocorre nas aulas teórico expositivas cursada num curso de graduação; em que a resolução de problemas teóricos expositivos se resume, em sua maioria, ao estudo das soluções das equações matemáticas em si.

Ademais, ao estudar os harmônicos esféricos e cilíndricos, compreendemos sua importância na descrição de sistemas naturais de alta simetria. Essas funções são ferramentas fundamentais na análise de sistemas que possuam simetrias parecidas, proporcionando um importante ponto de partida para proposição de teorias a eles associados. Como resultado deste trabalho, esperamos contribuir para a ampliação do conhecimento científico e tecnológico, fornecendo uma base sólida para futuras pesquisas e aplicações práticas na área de equações diferenciais parciais, modelagem de pontos quânticos e outros sistemas físicos complexos.

Por fim, reforçamos a relevância contínua desses estudos, incentivando o desenvolvimento de novas abordagens, métodos e técnicas para lidar com desafios ainda mais complexos em diversas áreas da ciência. A partir dessa sólida compreensão teórica, poderemos alcançar avanços significativos na exploração e compreensão do mundo físico, bem como no desenvolvimento de tecnologias inovadoras que beneficiem a sociedade como um todo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] MACHADO, K. D. **Teoria do Eletromagnetismo.** V.1 **-** Ponta grossa, UEPG, 2000

[2] DAVID J. GRIFFITTS. **Eletrodinâmica** 3 Ed. 4 de abr. de 2017

[3] COSTA, Éder Ritis Aragão. **Introdução à teoria básica das EDP's**. 2020.

[4] BOYCE, W. E.; DIPRIMA, R. C.; **Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno**. Tradução: Valéria Magalhães Iório. 8aed. Rio de Janeiro: LTC, 2006.

[5] SODRÉ, U.; **Equações Diferenciais Parciais**. Notas de Aula, Sercomtel, Rio de Janeiro, 2003, 42 pag.

[6] BIEZUNER, R. J.; **Equações Diferenciais Parciais i/ii**. Notas de Aula, UFMG, 2009, 124 pag.

[7] FORGER, Michael. **Equações Diferenciais Parciais**. São Paulo, 2014.

[8] COSTA, Éder Ritis Aragão. **Introdução à teoria básica das EDP's**. 2020

[9] BIEZUNER, Rodney Josué. **Notas de Aula Introdução EDP's** 2015.

[10] SODRÉ, Ulysses. **Equações diferenciais parciais**. Londrina:[sn], 2003.

[11] ARFKEN, G.; WEBER, H. **Física Matemática - Métodos Matemáticos para Engenharia e Física,** 1 ed**,** Editora CAMPUS ELSEVIER (UNIVERSITÁRIOS), 2007.

[12] SILVA, Hugo Gil; AFONSO, Marcos. **Energia solar fotovoltaica**: Contributo para um roadmapping do seu desenvolvimento tecnológico. 2009.

[13] RODRIGUES, José Eduardo Morgado. **Qualidade de energia: produção descentralizada**, desafios e soluções. 2017.

[14] VENTURIN, Carla Alves dos Santos. **Uma análise matemática para compreender o fenômeno câncer**. 2023.

[15] PIRES, j. g. **Uma iniciação às equações diferenciais estocásticas**: discussões e insights sem minudência matemática.

[16] CHIQUITO, Adenilson J. Pontos quânticos: átomos artificiais e transistores atômicos. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 23, p. 159-167, 2001.

[17] OLIVEIRA, Ravenna Rodrigues. **Fotodetector de ponto quântico semicondutor operando em frequência Terahertz.** 2021.

[18] MELO, Heitor Alves de. **Propriedades eletrônicas de pontos quânticos contendo muitos elétrons**. 2010.