



UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Dissertação de Mestrado

**OBTENÇÃO DA ENTROPIA DE SHANNON PARA O ÁTOMO DE
HIDROGÊNIO CONFINADO USANDO O MÉTODO DO
ELEMENTO FINITO**

Ademir de Jesus Santos

Salvador-BA

Setembro de 2019

UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

**OBTENÇÃO DA ENTROPIA DE SHANNON PARA O ÁTOMO DE
HIDROGÊNIO CONFINADO USANDO O MÉTODO DO
ELEMENTO FINITO**

Ademir de Jesus Santos

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Frederico Vasconcellos Prudente-IF- UFBA

Co-orientador: Prof. Dr. Marcílio N. Guimarães-IF- UFBA

Salvador-BA

Setembro de 2019

S237 Santos, Ademir de Jesus

Obtenção da entropia de shannon para o átomo de hidrogênio confinado usando o método do elemento finito/ Ademir de Jesus Santos. Salvador, 2019.

96 f.

Orientador: Professor Dr. Frederico Vasconcellos Prudente.

Co-orientador: Professor Dr. Marcílio N. Guimarães.

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal da Bahia. Instituto de Física, 2019.

1. Física. 2. Entropia de Shannon. 3. Átomo de Hidrogênio Confinado. 4. Método do Elemento Finito. I. Prudente, Frederico Vasconcellos. II. Guimarães, Marcílio N. III. Universidade Federal da Bahia. IV. Título.

CDU 539.3

Resumo

O presente trabalho implementa computacionalmente procedimentos numéricos eficientes para a obtenção da Entropia de Shannon para o Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c). Os procedimentos que usamos são baseados no formalismo variacional para estados ligados ao qual utiliza o Método do Elemento Finito (MEF) para a expansão da função de onda em termo de conjunto finito de funções de base. Especificamente, utilizamos a versão-p do MEF que tem, como característica, a facilidade de impor a condição de contorno adequada para o sistema confinado. A ligação da Teoria da Informação e a Teoria Quântica foi possível por intermédio das Entropias de Shannon nos Espaços das Posições (S_r) e nos Espaços dos Momentos (S_p), além da Soma Entrópica (S_t). Em particular, fazemos uma análise destas quantidades, em conjunto com os autovalores de Energia, com o Raio de Confinamento (r_c) para o Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c). Uma comparação entre o Átomo de Hidrogênio Confinado e uma Partícula Confinada em uma Gaiola é realizada, especialmente para a quantidade S_t , com o intuito de analisar o que acontece no regime de confinamento rigoroso. Os resultados são comparados com os da literatura, quando disponíveis.

Abstract

The present work implements computationally efficient numerical procedures to obtain Shannon Entropy for the Confined Hydrogen Atom (H_c). The procedures are based on the boundary variational formalism that uses the Finite Element Method (FEM) for the expansion of the wavefunction in terms of base functions. Specifically, we use the p-version of the MEF which has as characteristic the ease of imposing the proper boundary condition for the confined system. The connection of Information Theory and Quantum Theory was made possible through Shannon Entropies in Both Position (S_r) and Moment (S_p) Spaces, as well as Entropic Sum (S_t). In particular, we make an analysis of these quantities, together with the eigenvalues of Energy, with the Confinement Radius (r_c) for the Confined Hydrogen Atom (H_c). A comparison between the Confined Hydrogen Atom and a Particle Confined in a Gage is made, especially for the quantity S_t , in order to analyze what happens in the rigorous confinement regime. Results are compared with those in the literature, when available.

Agradecimentos

À Deus por me dar uma segunda chance de viver em 2017.

Aos professores: Dr. Frederico Vasconcelos (IF-UFBA) e Dr. Marcílio Nunes (IF-UFBA) pela proposta de trabalho e orientação na construção desta Dissertação. Sou grato aos dois professores pela paciência, simplicidade e humildade das inúmeras reuniões que tivemos.

Aos professores Dr^a Ana Carla Bitencourt e Dr. Mirco Ragni que me proporcionaram na graduação da UFRB/CFP a iniciação científica, que com o passar do tempo iria dá-me base e maturidade para encarar uma pós-graduação em Física.

Aos professores do Instituto de Física da UFBA: Dr. Jailton Souza, Dr. Marcos Melo, Dr. Denis Gilbert, Dr^a Manuela Souza, Dr. Michael Dias, Dr^a. Aline Medina, Dr. Ricardo Marinho, Dr. Ricardo Miranda, Dr. Thierry Jacques, Dr. Cássio Pigozzo, Dr. Ernesto Borges e outros.

Aos meus ex-professores da UFRB/CFP: Dr. Glênon Dutra, Dr. Sérgio Boss, Msc. Rafael Souza (in memoriam), Dr. Júlio César do Espírito Santos (in memoriam), Dr. José Geraldo Oliveira, Dr^a Simone Fernandes, Dr^a Denise Mesquita, Dr. Álvaro Serafim, Msc. Jabes Francisco, Dr. Djeissom Silva e outros.

Aos funcionários do Instituto de Física da UFBA pela boa convivência em especial ao Gleidson (pelas conversas) ao técnico-administrativo Marcos Paulo , Tia Del, Gilmar, Janaina e outros.

Aos meus pais: Senhor Antonio e Dona Antonieta pelas palavras sábias, educação, dedicação, amor e carinho recebam minha imensa gratidão.

Às minhas irmãs: Roseane, Vanessa, Patrícia e Aline, sou grato por vocês existirem em minha vida.

Aos meus sobrinhos: Rafael Andrade, Safira Morena, Alberto Antônio e Pedro Swahili.

À minha família: Tia Raquel, Professora aposentada Tia Maria José, Professora aposentada Tia Benedita, Tia Regina, Professora aposentada Tia Carlota, Tia Perolina, Tia Catarina, Tia Xica (in memoria) e outros. Aos primos: Maiana, Maria da Conceição, Hélio, Adailton, Daicinho, Sandro (in memoria), Izana, Ilana e outros.

À minha namorada, Professora Luciana Santos, pelo amor e carinho, os inúmeros conselhos dados, pela nossa trajetória deste o tempo de graduação sou grato por sua existência em minha vida. Sem o apoio deste ser especial não conseguiria concluir este

curso, além de companheira ela no meio desse curso de Mestrado foi a empresária na minha continuação no mesmo.

Aos discentes da pós-graduação da IF-UFBA: Dr. Wallas Nascimento (amigo de estudo), Leonardo Cerqueira (amigo de sempre), Ronaldo, Welberth, Leonardo Paiva, Alessandro, Felipe Ventura, Rosana, Mariana, Geisiane, Wilderson, Miguel, Luan, Rafael Cordeiro, George, Deric, Vargner, Cícero, Rafael, Pedro, Carla, Dr. Elenilson Santos, Isabela, Olavo, Daniel, Lucas Simões. Rafael, Nilton Cesar, José Nilton, Robenilson, Beliato, Igor Emanuel, Fábio Juvêncio, Erick Soares, Yulo Augusto e outros.

Aos professores, funcionários e ex-alunos dos Colégios Estaduais: Luís Viana Filho, Nova Itarana- BA (CELVF) e Luiz Eduardo Magalhães, Santa Teresinha-BA (CELEM).

Aos amigos de graduação: Renato Francisco, José Roberto (Zé), Aline Ferreira, Célia, Edmilson Marcêdo (in memoriam), Isaias, Antonio Marcos, Marcos Daniel, Antônio Albérico, Elder, Davi, Léa Almeida, Gerlan e outros.

Aos meus amigos: Senhor José Almeida (Sogro), Dona Lúcia (Sogra), Marcelo Oliver e família, José Antonio Cerqueira (Zé), Dona Maria Cerqueira (Vizinha), Professora Geisa Souza, Antonio Marcos Sarmiento (UFRB), Manoel (Careca), Dona Zélia, Matheus e outros.

Ao Conselho Nacional de Pesquisa (CNPq), pelo apoio financeiro.

Não diga que a canção esta perdida, tenha fé em Deus tenha fé na vida, tente outra vez! (Raul Seixas, Paulo Coelho, Marcelo Motta).

Não há lugar para a sabedoria onde não houver paciência (Santo Agostinho).

A mente que se abre a uma nova ideia jamais voltará ao seu tamanho original (Albert Einstein).

A liberdade é para a ciência o que o ar é para o animal [...]. O pensamento não deve se submeter, nem a um dogma, nem a um partido, nem a uma paixão, nem a um interesse, nem a uma ideia pré-concebida, nem a qualquer coisa, se não a si próprio, pois, para ele, submeter-se, seria deixar de existir (Henri Poincaré, *Dernières Pensées*, *apud* LOCHAK, 1992, p. 143)

Qual será o absurdo de hoje que será a verdade de amanhã? (Alfred North Whitehead [1925]).

Dedico este trabalho de dissertação aos meus pais, Dona Antonieta e Senhor Antonio, à minha família, à minha namorada Professora Luciana Santos (em especial pelos anos de luta que esteve ao meu lado), à minha madrinha Professora Fátima, à minha tia Professora aposentada pelo Estado da Bahia, Maria José e a todos que acreditaram nos meus esforços e na minha formação.

Sumário

Lista de Figuras.	11
Lista de Tabelas	13
Introdução	16
Capítulo 1	20
1.1- Método Variacional para Estados Estáveis ou Ligados.....	20
1.2- O Átomo de Hidrogênio em um Sistema Confinado.....	23
1.3- Solução Numérica para o Átomo de Hidrogênio em um Sistema Confinado.....	27
1.4- Entropia de Shannon.....	29
Capítulo 2. Metodologia.....	36
2.2- Versão-p do Método do Elemento Finito.	38
2.3- Procedimento Mecânico Quântico Auto- Consistente.	41
2.4- Junção da Teoria da Informação e a Teoria Quântica.	42
Capítulo 3- Resultados e Discussões.....	46
3.1- Átomo de Hidrogênio Livre.	46
3.2-Entropia Angular de Shannon.	47
3.3- Átomo de Hidrogênio Confinado (Hc).	48
3.3.1- Estado Fundamental ($n=1, l=0, m=0$).....	48
3.3.2 Átomo de Hidrogênio Confinado (Hc) para o Momento Angular de $l=0$	53
3.3.3- Átomo de Hidrogênio Confinado (Hc) para o Momento Angular de $l=1$	60
3.3.4. Átomo de Hidrogênio Confinado (Hc) para o Momento Angular de $l=2$	70
Capítulo 4-Conclusões e Perspectivas.....	80
Apêndice.....	82
Apêndice A- Unidades em Física Atômica e Molecular.	82
Apêndice B- Comparações dos Valores de $S(Rnl)$ e $S(Fnl)$	83
Apêndice C- Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (ec-) para: $l=0$; $l=1$ e $l=2$	91
Resultados de uma Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (ec-) para $l=0$	91
Resultados de uma Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (ec-) para $l=1$	92
Resultados de uma Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (ec-) para $l=2$	93
Bibliografia	94

Lista de Figuras.

- Figura 1. Diagrama de um sistema de comunicação extraída do SHANNON (1948).p.30
- Figura 2. Entropia no caso de duas possibilidades com probabilidades p e $(1-p)$. Imagem ilustrativa obtida do SHANNON (1948).....p.32
- Figura 3. Distribuição de probabilidade referente aos sistemas pictóricos A, B e C. Figura extraída da Tese de NASCIMENTO (2018.p. 10).....p.33
- Figura 4. Entropia de Shannon no Espaço das Posições (S_r) e no Espaço dos Momentos (S_p) versus Raio de Confinamento (r_c), para: $l=0$, $m=0$ e $n=1$p.49
- Figura 5. Soma Entrópica (S_t) versus Raio de Confinamento (r_c) para H_c e e_c^-p.50
- Figura 6. Energia (E) versus Raio de Confinamento (r_c) para 1s do átomo de Hidrogênio confinado (H_c).....p.52
- Figura 7. Energia versus Raio de Confinamento (r_c) para os estados 1s, 2s, 3s e 4s do H_cp.54
- Figura 8. S_r e S_p versus Raio de Confinamento (r_c) para o subnível s da tabela 5.p.55
- Figura 9. Soma Entrópica (S_t) versus Raio de Confinamento (r_c) para o subnível s.p.56.
- Figura 10. Soma Entrópica (S_t) versus Raio de Confinamento (r_c) para H_c e e_c^- para o estado quântico 2s.....p.57
- Figura 11. Soma Entrópica (S_t) versus Raio de Confinamento (r_c) para H_c e e_c^- utilizando o estado quântico 3s.....p.58
- Figura 12. Soma Entrópica (S_t) versus Raio de Confinamento (r_c) para H_c e e_c^- utilizando o estado quântico 4s.....p.59
- Figura 13. Energia versus Raio de Confinamento (r_c) para o subnível p.....p.62
- Figura 14. S_r e S_p versus Raio de Confinamento (r_c) para o subnível p ($m=0$).....p.63
- Figura 15. S_r e S_p versus Raio de Confinamento (r_c) para o subnível p ($|m|=1$), denotado nesta Dissertação por p_1p.64
- Figura 16. Soma Entrópica (S_t) versus Raio de Confinamento (r_c) para o subnível p do sistema H_cp.65
- Figura 17. Soma Entrópica versus Raio de Confinamento (r_c) para $2p_0$ e $2p_1$ para os sistemas H_c e e_c^-p.66
- Figura 18. Soma Entrópica versus Raio de Confinamento (r_c) para os estados $3p_0$ e $3p_1$ dos sistemas H_c e e_c^-p.67

Figura 19. Soma Entrópica versus Raio de Confinamento (r_c) para os estados $4p_0$ e $4p_1$ dos sistemas H_c e e_c^-	p.68
Figura 20. Energia versus Raio de Confinamento (r_c) para o subnível d da tabela 7..	p.71
Figura 21. S_r e S_p versus Raio de Confinamento (r_c) para o subnível d ($m=0$).....	p.72
Figura 22. S_r e S_p versus Raio de Confinamento (r_c) para o subnível d ($ m =1$), denotado nesta Dissertação por d_1	p.73
Figura 23. S_r e S_p versus Raio de Confinamento (r_c) para o subnível d ($ m =2$), denotado nesta Dissertação por d_2	p.74
Figura 24. Soma Entrópica versus Raio de Confinamento (r_c) para o subnível d do sistema H_c	p.76
Figura 25. Gráfico da Soma Entrópica (S_t) versus Raio de Confinamento (r_c) com $3d_0$, $3d_1$ e $3d_2$ para os sistemas H_c e e_c^-	p.77
Figura 26. Gráfico da Soma Entrópica (S_t) versus Raio de Confinamento (r_c) com $4d_0$, $4d_1$ e $4d_2$ para os sistemas H_c e e_c^-	p.78

Lista de Tabelas

- Tabela 1. Valores da Entropia Radial de Shannon $S(Rnl)$ e a Entropia do Momento Linear de Shannon $S(Fnl)$ para o Átomo de Hidrogênio Livre, $n \leq 4$ e $0 \leq l \leq n-1$ calculados pelas equações (2.17) e (2.23). Ref. $S(Rnl)$ e Ref. $S(Fnl)$ obtidos por JIAO et al., (2017).....p.46
- Tabela 2. Entropia Angular de Shannon para número quântico $l \leq 3$ e $0 \leq m \leq 3$ calculado pela Equação (2.19). Ref. $S(Ylm)$ obtido do JIAO et.al., (2017).....p.47
- Tabela 3. Valores das Entropias de Shannon do Espaço das Posições (S_r) e a Entropia de Shannon no Espaço dos Momentos (S_p) em função do raio de confinamento r_c : para o Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c). Como comparação, apresentamos os valores obtidos por JIAO et. al., (2017), identificado como referências de S_r e S_p . Todos os valores estão em unidade atômica (u.a.).....p.48
- Tabela 4. Valores da Energia (E) e da Soma Entrópica (S_t) em função do raio de confinamento para o Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c). Como comparação, são apresentados os valores obtidos por JIAO et.al., (2017), identificados com Ref. E e Ref. S_t p.49
- Tabela 5. Energia (E), Entropias de Shannon nos Espaços das Posições (S_r) e nos Espaços dos Momentos (S_p) e a Soma Entrópica (S_t) para os estados 1s, 2s, 3s e 4s do Átomo de Hidrogênio confinado (H_c) para diferentes raios de confinamento. Os valores estão em unidade atômica (u.a.).....p.52
- Tabela 6. E , S_r , S_p e S_t para o subnível p do Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) para diferentes raios de confinamento. Na primeira entrada para cada r_c são apresentados os resultados para $m=0$, e na segunda entrada $|m| =1$. Todos os valores estão em unidade atômica (u.a.).....p.60
- Tabela 7. E , S_r , S_p e S_t para o subnível d do Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) para diferentes raios de confinamento. Na primeira entrada para cada r_c são apresentados os resultados para $m=0$, na segunda entrada $|m| =1$, e na terceira entrada temos para $|m| =2$. Todos os valores estão em unidade atômica (u.a.).....p.69
- Tabela A.1: Algumas grandezas do Sistema de unidades atômicas (u.a.).....p.81
- Tabela B.1: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 1s. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).....p.82

Tabela B.2: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 2s. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).....	p.82
Tabela B.3: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 3s. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).....	p.83
Tabela B.4: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 4s. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).....	p.83
Tabela B.5: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 5s. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).....	p.84
Tabela B.6: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 2p. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).....	p.84
Tabela B.7: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 3p. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).....	p.85
Tabela B.8: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 4p. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).....	p.85
Tabela B.9: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 5p. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).....	p.86
Tabela B.10: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 6p. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).....	p.86
Tabela B.11: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 3d. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).....	p.87
Tabela B.12: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 4d. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).....	p.87
Tabela B.13: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 5d. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).....	p.88
Tabela B.14: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 6d. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).....	p.88
Tabela B.15: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 7d. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).....	p.89
Tabela C.1: Valores da Energia (E) e Soma Entrópica (S_t) em função do raio de confinamento (r_c) para uma partícula confinada em uma gaiola esférica. Para comparar os nossos cálculos temos as referências de (E) e (S_t) do NASCIMENTO (2018,p. 66-68).Todos os valores em u.a.....	p.90

Tabela C.2: Entropia de Shannon (S_r) e (S_p) em função do raio de confinamento (r_C) para a partícula confinada em uma gaiola esférica. Para comparar os nossos cálculos temos as referências de (S_r) e (S_p) NASCIMENTO (2018,p. 67). Todos os valores em u.a.....	p.90
Tabela C.3: Valores da Energia (E) e Soma Entrópica (S_t) em função do raio de confinamento (r_C) para uma partícula confinada em uma gaiola esférica. Todos os valores em u.a.....	p.91
Tabela C.4: Entropia de Shannon (S_r) e (S_p) em função do raio de confinamento (r_C) para a partícula confinada em uma gaiola esférica. Todos os valores em u.a.....	p.91
Tabela C.5: Valores da Energia (E) e Soma Entrópica (S_t) em função do raio de confinamento (r_C) para uma partícula confinada em uma gaiola esférica. Todos os valores em u.a.....	p.92
Tabela C.6: Entropia de Shannon (S_r) e (S_p) em função do raio de confinamento (r_C) para a partícula confinada em uma gaiola esférica. Todos os valores em u.a.....	p.92

Introdução

Uso do intelecto humano no esforço de elaborar conceito teórico para a compreensão dos fenômenos naturais advindas de ideias que às vezes extrapolam as próprias áreas de conhecimento e acabam por transpor fronteira, nesta perspectiva, investigações de sistemas quânticos confinados esfericamente têm atraído atenção considerável nos últimos anos devido à sua fundamental importância em muitos ramos da Física e da Química, como: a Física Atômica e Molecular, Astrofísica, Física da Matéria Condensada e Química Quântica JIAO et.al., (2017).

O próprio conceito de Entropia tem diversas visões nas três áreas de conhecimentos, a citar: Termodinâmica, Mecânica Estatística e na Teoria da Informação. Faremos um breve comentário nas três áreas mencionadas.

A Termodinâmica trata em fazer uma descrição macroscópica, que só se aplica a sistemas com um número suficientemente grande de partículas. Historicamente, suas Leis foram obtidas com experimentos e observações, ou seja, empíricas. A 2ª Lei da Termodinâmica esteve ligada com um problema de engenharia, surgido pouco após a invenção da máquina a vapor, procurando responder a pergunta: como se poderia aumentar o rendimento de uma máquina térmica? O engenheiro Francês Nicolas Sadi Carnot, em 1824 se debruçou em tal problema intitulando o trabalho “Reflexões Sobre a Potência Máxima do Fogo”, após este trabalho Rudolf Clausius em 1850 trouxe contribuições significativas, em seus estudos deriva a relação $\Delta S \geq 0$ para um sistema termicamente isolado, que pode ser entendida como uma enunciação da 2ª Lei da Termodinâmica. Ela diz que em um sistema fechado com um processo irreversível, a entropia S do sistema sempre aumenta. A desigualdade se aplica a processos irreversíveis e o sinal de igualdade a processos reversíveis, lembrando que estamos aplicando a um sistema fechado. No mundo real todos os processos são irreversíveis em maior ou menor grau devido ao atrito, à turbulência e etc., processos nos quais a entropia é constante são sempre aproximações NUSSENZVEIG (2002 v. 2), HALLIDAY; RESNICK (2009,v.2).

A Mecânica Estatística segundo LUZZI (1999, p.13), é um formalismo que visa explicar as propriedades macroscópicas da matéria com base no comportamento dinâmico de seus constituintes microscópicos. Ela tem por objetivo a interpretação atomística das propriedades macroscópica da matéria e radiação, tem a tarefa de fazer a

ponte sobre o laço entre a descrição microscópica dos fenômenos elementares e a descrição macroscópica dos sistemas em nossa escala. O início para a construção dessa área foi com o surgimento da Teoria Cinética dos gases, ao qual mostra que é possível deduzir e interpretar resultados válidos em níveis macroscópicos, tais como a equação de estado de um gás, tomando como partida sua estrutura microscópica na escala atômica, também é importante destacar o trabalho de James Clerk Maxwell em 1859, ao qual obteve a distribuição das velocidades moleculares num gás em equilíbrio térmico à temperatura T. A entropia, depois, passa a ser interpretado com a ideia de ensemble estatístico apresentado do Josiah Gibbs, neste contexto, Boltzmann em 1876 deu continuidade aos trabalhos do Maxwell, introduzindo as noções de microestado e macroestado. Nesta perspectiva Ludwig Boltzmann (1872) estabeleceu uma interpretação estatística da 2ª Lei da Termodinâmica através da relação $S = k \ln W$, onde k é uma constante e W é o peso estatístico do macroestado de entropia S , assim a entropia de Boltzmann- Gibbs fica dada na formulação microcanônica e canônica pela equação $S = -K \sum_i p_i \ln p_i$ NUSSENZVEIG (2002 v. 2), HALLIDAY; RESNICK (2009,v.2) ; NASCIMENTO (2018, p. 1 e p. 2) .

A Teoria da Informação ou como também é conhecida de Teoria Matemática da Comunicação, tem como base solucionar problemas relacionados aos avanços Tecnológicos da Telecomunicação, a problemática central é criar mecanismos para reproduzir uma mensagem emitida de um ponto inicial até um outro ponto de destino final. Procurando solucionar tal problemática surge a Teoria da Informação ou Entropia de Shannon, ao qual é uma medida da informação originada na escolha de uma dada mensagem dentre um repertório definido por uma fonte de informação SHANNON (1948) e GLEICK (2013).

Segundo NASCIMENTO (2018, p. 2), originalmente, tida como uma área autônoma, a Teoria da Informação passou a ter seus conceitos e principais ideias utilizadas por diversas áreas do conhecimento, principalmente, por meio de sua entropia informacional. Na Física, as entropias da conexão entre Teoria da Informação e Teoria Quântica, são definidas as entropias da informação nos espaços das posições S_r e dos espaços dos momentos S_p , bem como a incerteza entrópica baseada na soma $S_t = S_r + S_p$.

O estudo teórico para determinação de propriedades de sistemas quânticos pode ser realizado resolvendo a equação de Schrodinger dependente ou independente do

tempo. A Física Atômica e Molecular na área teórica tem o papel de desenvolver modelos teóricos e numéricos computacionais eficientes para a descrição da dinâmica desses sistemas físicos COSTA; PRUDENTE (2007) e VIANNA; FAZZIO; CANUTO (2004). Geralmente a primeira das aproximações utilizadas é de Born- Oppenheimer ou como também é chamada aproximação adiabática que consiste na resolução da Equação de Schrodinger tendo dependência ou não em relação ao tempo, para a movimentação dos núcleos.

Entendendo que o sistema confinado do Átomo de Hidrogênio é um modelo de átomo sobre pressão. Por exemplo em planetas gigantes os átomos estão em pressões altíssimas, por isso o confinamento é uma forma de deixa-lo sobre pressão. Então, a dependência, do confinamento representaria o que sobre a pressão no átomo? Já a Entropia de Shannon tem haver com a incerteza da posição e do momento. Com a variação do confinamento como essa incerteza vai se comportar? NASCIMENTO (2018) fez um estudo de confinamento utilizando a Entropia de Shannon ou como também é conhecida Teoria da Informação, abordando em seu trabalho uma Partícula Confinada em uma Caixa ou em uma Gaiola e um sistema confinado de duas partículas. No trabalho citado nas linhas acima, ele utiliza o estado fundamental ao qual o harmônico esférico não varia, ou seja, é uma constante, no entanto nós iremos utilizar o Método do Elemento Finito ao qual permite usar qualquer estado. Para o desenvolvimento deste processo é preciso fazer a expansão da função de onda em conjunto de funções de base, caindo assim em um problema matricial, para tal cálculo utilizamos o programa computacional Fortran 77 ao qual consegue dar bons resultados aos cálculos que propomos.

Diversos Pesquisadores a citar, GUIMARÃES (2007), NASCIMENTO; PRUDENTE (2016), ALMEIDA; GUIMARÃES; PRUDENTE (2005), NASCIMENTO (2018), GUILLOT (1999) e GUILLOT (2005), têm estudado estes sistemas nas últimas décadas, incluindo: oscilador harmônico unidimensional; átomo de hidrogênio; átomos embebido em meio neutro (plasma neutro ou hélio líquido) e no uso na compreensão de planetas com grande quantidade de massa. No entanto segundo JIAO et.al., (2017), a Entropia de Shannon para o Átomo de Hidrogênio confinado para os demais estados não sendo o estado fundamental, ainda não tem um estudo bem determinado.

Nesta perspectiva, o objetivo desta Dissertação é trabalhar com o Átomo de Hidrogênio no sistema confinado fazendo uma associação com a Entropia de Shannon

no Espaço das Posições e Espaço dos Momentos e encontrar resposta(s) para o limite da Soma Entrópica com o raio de confinamento tendendo a zero, que foi uma questão aberta deixada pelo artigo do JIAO et.al., (2017).

Apresentação desta Dissertação está organizada nas seguintes partes: A Teoria no Capítulo 1: Método Variacional para Estados Estáveis ou Ligados; O Átomo de Hidrogênio em um Sistema Confinado; Solução Numérica para o Átomo de Hidrogênio em um Sistema Confinado; Entropia de Shannon. No Capítulo 2 a metodologia que se destaca por: Método do Elemento Finito; Versão- p do Método do Elemento Finito; Procedimento Mecânico Quântico Auto- Consistente Proposto; Junção da Teoria da Informação e a Teoria Quântica. Por fim, no Capítulo 3 temos: Resultados e Discursões; Conclusões e Perspectivas. No Apêndice A: Unidades em Física Atômica e Molecular; no Apêndice B: Apresentamos comparações dos valores de $S(Rnl)$ e $S(Fnl)$ e no Apêndice C: Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (e_c^-) para $l=0$, $l=1$ e $l=2$.

Capítulo 1

1.1- Método Variacional para Estados Estáveis ou Ligados.

Neste capítulo discutiremos o Método Variacional que é um dos Métodos de Aproximação aplicado a energia para estado ligado ou estados estáveis, alguns autores tomando como exemplo o GRIFFITHS (2011), também o chamam de Princípio Variacional criando assim, um sinônimo. Aqui iremos optar em chamar pela primeira designação Método Variacional.

Segundo NOVAES e STUDART (2016, p. 85), existem sistemas que podem ser resolvidos exatamente, ou seja, para os quais existem expressões simples e explícitas para os níveis de energia e para os estados estacionários. Esses sistemas são extremamente particulares e simplificados. Para problemas mais realistas e de maior importância soluções exatas não estão disponíveis nesses casos, precisamos nos contentar com soluções aproximadas.

Um procedimento para achar resultados aproximados para problemas em Mecânica Quântica é o Método Variacional. A essência desse método consiste no fato de que os estados estacionários atendem uma propriedade muito particular: eles minimizam a energia em relação a outras funções.

De acordo SILVA (2013), Método Variacional trata-se de um princípio importante em Química Quântica e Física Quântica, em particular em Física Atômica e Molecular, não só porque permite obter soluções aproximadas para a equação de Schrodinger como também porque fornece um critério, o valor mínimo de energia.

Falaremos agora do formalismo variacional para os estados estáveis ou ligado. Precisamos encontrar o funcional de energia dado por :

$$J[\Psi] = \int d\mathbf{x} \Psi^*(\mathbf{x}) \{ \hat{H} - E \} \Psi(\mathbf{x}) \quad (1.1)$$

Em que $d\mathbf{x}$ representa a posição de todas as partículas do sistema, E é o multiplicado de Lagrange e o operador Hamiltoniano é \hat{H} que vale:

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2} \sum_{j=1}^N \frac{1}{m_j} \nabla_j^2 + V(\mathbf{x}) \quad (1.2)$$

O objetivo é resolver a Equação de Schrodinger atemporal.

$$\hat{H} \Psi(\mathbf{x}) = E \Psi(\mathbf{x}) \quad (1.3)$$

Substituindo a equação (1.2) na equação (1.1) e aplicando a identidade de Green ao funcional, encontra-se:

$$J[\Psi, \Psi_S] = \int_{\Omega} d\mathbf{x} \left\{ \frac{\hbar^2}{2} \sum_j \frac{(\nabla_j \Psi^*(\mathbf{x}))(\nabla_j \Psi(\mathbf{x}))}{m_j} + \Psi^*(\mathbf{x})[V(\mathbf{r}) - E]\Psi(\mathbf{x}) \right\} \quad (1.4)$$

Fazendo a expansão na função de onda $\Psi(\mathbf{x})$ em conjunto finito de funções de base $\{f_i\}$ acha as autofunções e os autovalores de $J[\Psi, \Psi_S]$, sendo $i=1, 2, 3, \dots, p$.

$$\Psi(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^p c_i f_i(\mathbf{x}) \quad (1.5)$$

cujo complexo é

$$\Psi^*(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^p c_i^* f_i^*(\mathbf{x}) \quad (1.6)$$

$\{c_i\}$ são os coeficientes da expansão. Pegando as equações (1.5) e (1.6) e colocando na equação (1.4), encontra-se o funcional de energia.

$$J[c_i^*, c_i'] = \sum_{i,i'} c_i^* \int_{\Omega} d\mathbf{x} \left\{ \frac{\hbar^2}{2} \sum_j \frac{\nabla_j f_i^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla_j f_{i'}(\mathbf{x})}{m_j} + f_i^*(\mathbf{x})[V(\mathbf{x}) - E]f_{i'}(\mathbf{x}) \right\} c_i' \quad (1.7)$$

Adotando a notação matricial:

$$\mathbf{c} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_p \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{c}^\dagger = [c_1^*, c_2^*, c_3^*, \dots, c_p^*] \quad (1.8)$$

$$\{\mathbf{H}\}_{i,i'} = \int_{\Omega} d\mathbf{x} \left\{ \frac{\hbar^2}{2} \sum_j \frac{\nabla_j f_i^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla_j f_{i'}(\mathbf{x})}{m_j} + f_i^*(\mathbf{x})V(\mathbf{x})f_{i'}(\mathbf{x}) \right\} \quad (1.9)$$

$$\{\mathbf{O}\}_{i,i'} = \int_{\Omega} d\mathbf{x} f_i^*(\mathbf{x}) f_{i'}(\mathbf{x}) \quad (1.10)$$

É possível descrever o funcional de Energia da equação (1.7), como:

$$\mathbf{J}[\mathbf{c}] = \mathbf{c}^\dagger \mathbf{H} \mathbf{c} - E \mathbf{c}^\dagger \mathbf{O} \mathbf{c} \quad (1.11)$$

Estabelecendo a condição de estacionaridade na equação (1.11) obtém-se:

$$\begin{aligned}
\delta \mathbf{J} [\mathbf{c}] &= \mathbf{J} [\mathbf{c} + \delta \mathbf{c}] - \mathbf{J} [\mathbf{c}] \\
&= \delta \mathbf{c}^\dagger (\mathbf{H} - \mathbf{E}\mathbf{O}) \mathbf{c} + \mathbf{c}^\dagger (\mathbf{H} - \mathbf{E}\mathbf{O}) \delta \mathbf{c} + \delta \mathbf{c}^\dagger (\mathbf{H} - \mathbf{E}\mathbf{O}) \delta \mathbf{c} \\
&= \delta \mathbf{c}^\dagger \mathbf{H} \mathbf{c} - \delta \mathbf{c}^\dagger \mathbf{E} \mathbf{O} \mathbf{c} + \mathbf{c}^\dagger \mathbf{H} \delta \mathbf{c} - \mathbf{c}^\dagger \mathbf{E} \mathbf{O} \delta \mathbf{c} + \delta \mathbf{c}^\dagger \mathbf{H} \delta \mathbf{c} - \delta \mathbf{c}^\dagger \mathbf{E} \mathbf{O} \delta \mathbf{c} = 0
\end{aligned}$$

Assumindo que os termos \mathbf{c}^\dagger e \mathbf{c} são arbitrários e desvalendo os termos de segunda ordem $\delta \mathbf{c}$, encontramos:

$$\mathbf{H} \mathbf{c} = \mathbf{E} \mathbf{O} \mathbf{c} \quad (1.12)$$

$$\mathbf{c}^\dagger \mathbf{H} = \mathbf{E} \mathbf{c}^\dagger \mathbf{O} \quad (1.13)$$

A hermeticidade da matriz Hamiltoniana e a Matriz de Superposição faz com que a equação (1.13) seja adjunta da equação (1.12).

É importante notar que ao utilizar o formalismo variacional o espectro de energia converge para o verdadeiro com o aumento do número de funções de base, e as respectivas funções de onda de determinado sistema quântico confinado são solucionadas resolvendo o problema de autovalor- autovetor generalizado da equação (1.12).

É preciso escolher funções de base certas para fazer a expansão na função de onda em estudo. Nossa proposta é utilizar a versão-p do Método do Elemento Finito, assunto apresentado no capítulo 2.

Para NOVAES e STUDART (2016, p. 91), a eficiência do Método Variacional consiste, portanto em ser capaz de estimar funções que sejam boas aproximações para os estados estacionários. Uma vez feito isso, minimiza-se o funcional apropriado (relacionado à energia) em relação aos parâmetros que especificam as funções.

Já para o GRIFFITHS (2011), o único problema com esse método é que você nunca sabe com certeza o quanto próximo do alvo está, a única garantia é a de ter um limite superior.

1.2- O Átomo de Hidrogênio em um Sistema Confinado.

Adotaremos agora um sistema de dois corpos interagentes, no caso um próton e um elétron, de massa m_a e m_b confinada no espaço. A equação de Schrodinger independente do tempo para esse sistema é mostrado abaixo:

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) + V(|\mathbf{r}|) \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}) \quad (1.14)$$

O operador hamiltoniano que descreve este caso é dado por:

$$\widehat{H}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = -\frac{\hbar^2}{2m_a} \nabla_a^2 - \frac{\hbar^2}{2m_b} \nabla_b^2 + V_{int}(|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|) + V_{conf}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) \quad (1.15)$$

Em que \mathbf{r}_a e \mathbf{r}_b corresponde as coordenadas de cada corpo, os laplacianos em coordenadas cartesianas para cada um desses corpos é dado por ∇_a^2 e ∇_b^2 , o potencial de interação de Coulomb é dado por: $V_{int}(|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|)$. Por fim, temos $V_{conf}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)$ que corresponde ao potencial de confinamento dos dois corpos.

Pegando o movimento translacional do átomo em sua totalidade e a seguinte no movimento relativo dos dois corpos, as coordenadas que têm relação com o centro de massa são:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a \quad \text{e} \quad \mathbf{R} = \frac{(m_a \mathbf{r}_a + m_b \mathbf{r}_b)}{(m_a + m_b)} \quad (1.16)$$

Consequentemente, o hamiltoniano fica

$$\widehat{H} = \widehat{H}_R + \widehat{H}_r + V_{conf}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \quad (1.17)$$

Sendo:

$$\widehat{H}_R = \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \quad (1.18)$$

$$\widehat{H}_r = \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + V_{int}(r) \quad (1.19)$$

A equação (1.18) é o termo relacionado ao movimento do centro de massa, com massa total dada por $M = m_a + m_b$. Na equação (1.19) mostra-se o termo que corresponde ao movimento relativo do átomo, a massa reduzida é dada por $\mu = \frac{(m_a m_b)}{(m_a + m_b)}$.

O objetivo da transformação de coordenadas relativas para centro de massa é diminuir o problema com seis graus de liberdade para três graus de liberdades.

Quando há confinamento espacial, o movimento do centro de massa não pode ser separado como acontece em sistemas livres, assim a resolução do sistema fica complicada.

Vamos analisar o Átomo de Hidrogênio Confinado em uma Esfera de Raio r_c por uma barreira de potencial infinita, adotando uma massa infinita para o núcleo e fixando-o no centro da esfera, a equação (1.18) zera já que consideramos o núcleo parado e o hamiltoniano total do sistema confinado tornar-se a equação (1.19) somado ao potencial confinante. Neste caso, o problema central $V(r)$ fica:

$$V(r) = \begin{cases} V_{int}(r) & \text{se } r < r_c \\ \infty & \text{se } r \geq r_c \end{cases} \quad (1.20)$$

Por questões de simetria do sistema, utilizaremos coordenadas polares esféricas:

$$x = r \cos \theta \cdot \text{sen } \phi$$

$$y = r \text{ sen } \theta \cdot \text{sen } \phi$$

$$z = r \cos \phi$$

Com o operador Hamiltoniano dado por:

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) \quad (1.21)$$

Sendo o operador momento angular representado por:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\text{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \text{sen}\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\text{sen}^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (1.22)$$

As autofunções do operador \hat{L}^2 são os harmônicos esféricos $Y_l^m(\theta, \phi)$, com autovalores dado pela equação a seguir:

$$\hat{L}^2 Y_l^m(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (1.23)$$

A letra “ l ” mostrada na equação anterior é o número quântico azimutal ou também denominado de número quântico do momento angular, enquanto que “ m ” é o número quântico magnético.

É possível demonstrar que das equações (1.21) e (1.22) que \hat{H} e \hat{L}^2 tem uma relação de comutação entre si e, conseqüentemente, uma base em comum. Em termos dos harmônicos esféricos faz a expansão da função de onda, obtendo:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{l'} R_{l'}(r) Y_{l'}^m(\theta, \phi) \quad (1.24)$$

Pegando a equação (1.24) e substituindo na equação (1.14) temos:

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) + V(|\mathbf{r}|) \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r})$$

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \sum_{l'} R_{l'}(r) Y_{l'}^m(\theta, \phi) + V(|\mathbf{r}|) \sum_{l'} R_{l'}(r) Y_{l'}^m(\theta, \phi) = E \sum_{l'} R_{l'}(r) Y_{l'}^m(\theta, \phi)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \sum_{l'} R_{l'}(r) Y_{l'}^m(\theta, \phi) + V(|\mathbf{r}|) \sum_{l'} R_{l'}(r) Y_{l'}^m(\theta, \phi) - E \sum_{l'} R_{l'}(r) Y_{l'}^m(\theta, \phi) = 0$$

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \sum_{l'} R_{l'}(r) Y_{l'}^m(\theta, \phi) + \sum_{l'} R_{l'}(r) Y_{l'}^m(\theta, \phi) \{ V(|\mathbf{r}|) - E \} = 0$$

Fazendo o produto na esquerda por $Y_l^{m*}(\theta, \phi)$

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \sum_{l'} R_{l'}(r) Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_{l'}^m(\theta, \phi) + \sum_{l'} R_{l'}(r) Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_{l'}^m(\theta, \phi) \{ V(|\mathbf{r}|) - E \} = 0$$

Fazendo uma integração sobre uma esfera,

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \sum_{l'} \int d\Omega R_{l'}(r) Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_{l'}^m(\theta, \phi) + \sum_{l'} \int d\Omega R_{l'}(r) Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_{l'}^m(\theta, \phi) \{ V(|\mathbf{r}|) - E \} = 0$$

$$\sum_{l'} \int d\Omega R_{l'}(r) Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_{l'}^m(\theta, \phi) \{ \hat{H} - E \} = 0$$

Utilizando o Hamiltoniano da equação (1.21), ficamos com:

$$\sum_{l'} \int d\Omega R_{l'}(r) Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_{l'}^m(\theta, \phi) \left\{ \frac{-\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) - E \right\} = 0$$

$$\sum_{l'} \left\{ \frac{-\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} R_{l'}(r) \int d\Omega Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_{l'}^m(\theta, \phi) + \frac{1}{2\mu r^2} R_{l'}(r) \int d\Omega Y_l^{m*}(\theta, \phi) \hat{L}^2 Y_{l'}^m(\theta, \phi) + [V(r) - E] R_{l'}(r) \int d\Omega Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_{l'}^m(\theta, \phi) \right\} = 0 \quad (1.25)$$

Utilizando a propriedade de ortogonalidade para os harmônicos esféricos, descrito abaixo:

$$\int d\Omega Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (1.26)$$

e

$$\begin{aligned} \int d\Omega Y_l^{m*}(\theta, \phi) \hat{L}^2 Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi) &= \hbar^2 l'(l'+1) \int d\Omega Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi) \\ &= \hbar^2 l'(l'+1) \delta_{ll'} \delta_{mm'} \end{aligned} \quad (1.27)$$

Substituindo essas duas expressões (1.26) e (1.27) na equação (1.25),

Encontramos:

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} R_{l'}(r) + \frac{1}{2\mu r^2} R_{l'}(r) \hbar^2 l'(l'+1) + [V(r) - E] R_{l'}(r) = 0 \quad (1.28)$$

Utilizando 1 para as unidades atômicas: \hbar , μ , e. Chegamos na parte radial da Equação de Schrodinger.

$$\left\{ \frac{-1}{2r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V(r) - E \right\} R_l(r) = 0 \quad (1.29)$$

Em que

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{1}{r}, & r < r_c \\ \infty, & r \geq r_c \end{cases} \quad (1.30)$$

Chega-se a conclusão que a equação de uma dimensão (1.29) restringe-se ao caso de três dimensões da Equação de Schrodinger. Ao fazer a função de onda se anular na barreira da superfície, a condição de confinamento é imposta, em outras palavras, a condição de contorno $R_l(r_c) = 0$ deve ser satisfeita pela parte radial da função de onda.

1.3- Solução Numérica para o Átomo de Hidrogênio em um Sistema Confinado.

Descobrir os resultados que atendem a condição de extremo de um funcional de energia da equação (1.31) é correspondente a solucionar a Equação de Schrodinger independente do tempo para o átomo de hidrogênio.

$$J[\Psi] = \int_{\Omega} d\mathbf{x} \Psi^*(\mathbf{r}) \{\hat{H} - E\} \Psi(\mathbf{r}) \quad (1.31)$$

Utilizando a equação (1.21) para \hat{H} , ficamos:

$$J[\Psi] = \int_{\Omega} d\mathbf{x} \Psi^*(\mathbf{r}) \left\{ \frac{-\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} + V(\mathbf{r}) - E \right\} \Psi(\mathbf{r}) \quad (1.32)$$

Fazendo uma expansão da função de onda em termos dos harmônicos esféricos na equação (1.32) com a equação (1.33),

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_l \frac{\chi_l(r)}{r} Y_l^m(\theta, \phi) \quad (1.33)$$

E com auxílio das equações (1.26) e (1.27), considerando $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$, é possível descrever o funcional na equação abaixo.

$$J[\Psi] = \sum_l J_l[\chi_l]$$

Em que

$$J_l[\chi_l] = \int_0^{r_c} dr \chi_l^*(r) \left\{ \frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + V_l^{ef}(r) - E \right\} \chi_l(r) \quad (1.34)$$

$V_l^{ef}(r)$ é o potencial efetivo. Utilizando a regra do produto para o termo da segunda derivada da equação (1.34), vamos fazer sem o sinal de menos.

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d}{dr} \left(\chi_l^*(r) \frac{d}{dr} \chi_l(r) \right) dr = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{d\chi_l^*(r)}{dr} \frac{d\chi_l(r)}{dr} + \chi_l^*(r) \frac{d^2}{dr^2} \chi_l(r) \right] dr \quad (1.35)$$

Integrando a equação (1.35).

$$\int \frac{\hbar^2}{2\mu} \chi_l^*(r) \frac{d^2}{dr^2} \chi_l(r) dr = \int \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d}{dr} \left(\chi_l^*(r) \frac{d}{dr} \chi_l(r) \right) dr - \int \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d\chi_l^*(r)}{dr} \frac{d\chi_l(r)}{dr} dr \quad (1.36)$$

Considerando as condições:

$$\delta_{ll'} = \begin{cases} 0 & \text{se } l \neq l' \\ 1 & \text{se } l = l' \end{cases}$$

Neste caso, a primeira equação após a igualdade da equação (1.36) zera, pois...,restando.

$$\int \frac{\hbar^2}{2\mu} \chi_l^*(r) \frac{d^2}{dr^2} \chi_l(r) dr = - \int \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d\chi_l^*(r)}{dr} \frac{d\chi_l(r)}{dr} dr \quad (1.37)$$

Substituindo a equação (1.37) na equação (1.34) no termo da segunda derivada, ficamos com.

$$J_l[\chi_l] = \int_0^{r_c} dr \left\{ \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d\chi_l^*(r)}{dr} \frac{d\chi_l(r)}{dr} + \chi_l^*(r) [V_l^{ef}(r) - E] \chi_l(r) \right\} \quad (1.38)$$

A equação. (1.38) é um funcional de energia para um momento angular específico l , $V_l^{ef}(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} l(l+1) + V(r)$. Supondo que $\chi_l(r)$ deva zerar na superfície de uma esfera com raio $r = r_c$, dado o potencial da equação (1.20).

Para encontrarmos as autofunções radiais e os autovalores de energia devemos expandir $\chi_l(r)$ em termos de um conjunto finito de funções de base $\{f_j(r)\}$ dado pela equação a seguir:

$$\chi_l(r) = \sum_{j=1}^p c_j^l f_j(r) \quad (1.39)$$

Sendo $\{c_j^l\}$ os coeficientes da expansão, utilizando o funcional da equação (1.38) e fazendo no mesmo a imposição da condição de estacionaridade, chegamos a conclusão que as soluções variacionais são conseguidas resolvendo o problema de autovalor-autovetor generalizado para obtermos as respectivas funções de onda de um átomo ou molécula qualquer dado pela equação abaixo:

$$\mathbf{H}^l \mathbf{c} = E \mathbf{O} \mathbf{c} \quad (1.40)$$

Em que \mathbf{c} é o vetor dos coeficientes. $\{\mathbf{H}^l\}_{ij}$ da equação a seguir, é a representação matricial em blocos dos termos diagonais do Operador Hamiltoniano nas funções de base, também denominado de Matriz Hamiltoniana.

$$\{\mathbf{H}^l\}_{ij} = \int_0^{r_c} dr \left\{ \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{df_i^*(r)}{dr} \frac{df_j(r)}{dr} + f_i^*(r) V_l^{ef}(r) f_j(r) \right\} \quad (1.41)$$

$\{\mathbf{O}\}_{ij}$ é a Matriz Overlap. Também, chamada de Matriz de Superposição das funções de base,

$$\{\mathbf{O}\}_{ij} = \int_0^{r_c} dr f_i^*(r) f_j(r) \quad (1.42)$$

Teremos que impor $\chi_l(0) = 0$ para que a função de onda da equação (1.33) seja contínua na origem e que $\chi_l(r_c) = 0$ devido o confinamento espacial. Para isso, teremos que utilizar o método de expansão da função da equação (1.39) que consiste em empregar a versão-p do Método do Elemento Finito.

1.4- Entropia de Shannon.

“ A energia do mundo é constante. A entropia do mundo tende a um máximo” (Clausius)

Claude Shannon¹ publica em 1948 o trabalho intitulado ‘A Mathematical Theory of Communication’ dando início a Teoria Matemática da Comunicação, ou comumente como é chamada Teoria da Informação. Os entendimentos de seus conceitos proporcionaram o desenvolvimento de aplicações na Era Digital.

De acordo com BORGES (1999, p. 458 e 459), a visão da Entropia, dentro da Teoria da Informação ocorreu durante e após a Segunda Guerra Mundial, no esforço para decifrar mensagens criptografadas, este conceito vem de criptografia que é a arte de tornar a mensagem inteligível apenas para seu receptor. Na qual são usadas Técnicas de transposição e de substituição de sinais. A reversibilidade é um pressuposto básico para qualquer processo criptográfico, e o elemento secreto que garante sua correta reversão é chamada “chave”. Para a criptografia ser eficiente, ela deve evitar as características que tornam o texto decifrável, sendo que a principal dela é a análise estatística dos sinais e das palavras. Esta é a área de contato entre a criptografia e a criptologia com a Teoria da Informação PINEDA (2006, p. 48).

Neste contexto, a Entropia é entendida como uma medida do “grau de incerteza que existe antes que uma escolha seja feita”, ainda com base no trabalho de BORGES (1999), é razoável fazer a suposição que a medida da incerteza dependa também da probabilidade p_i de ocorrência de cada evento i , $S_1 = (S_1\{p_i\}, W)$. Para cada evento i

¹ Claude Shannon com Alan Turing durante a Segunda Guerra Mundial (1939-1945), bem como sua participação no Projeto X, que foi um projeto secreto conduzido pelos Laboratórios Bell para a criptografia da voz humana PINEDA (2006, p. 24).

existe uma medida de incerteza $I_1(p_i)$ que depende da sua probabilidade de ocorrência p_i . É possível fazer a suposição que a incerteza total S_1 , associada ao conjunto de eventos possíveis, seja uma média das incertezas associadas a cada evento i particular ponderada pela probabilidade de ocorrência:

$$S_1 = \sum_{i=1}^w p_i I_1(p_i) \quad (1.43)$$

Quanto mais diminuirmos p_i , maior a nossa incerteza com relação a esse evento ($I_1(p_i)$ deve ser monotonamente decrescente com p_i). No entanto, se um evento i é certo ($p_i = 1$), então $I_1(1) = 0$.

Uma característica que deve esperar de $I_1(p_i)$, apesar de

$$\lim_{p_i \rightarrow 0} I_1(p_i) = \infty \quad (1.44)$$

e que

$$\lim_{p_i \rightarrow 0} p_i I_1(p_i) = 0 \quad (1.45)$$

Vamos compreender com exemplos o que essas duas equações querem nos dizer, encontrar um Dinossauro hoje em dia é um evento excepcionalmente raro, e a incerteza associada a essa casualidade é praticamente infinita que é representada pela equação (1.44), mas apesar disso você sai por aí caminhando sem medo que ocorra esse encontro, isso é refletido na equação (1.45).

Conforme BORGES (1999, p.459) comenta, uma propriedade que se costuma esperar da medida de incerteza é que se tivermos um evento composto por dois outros eventos independentes, por exemplo: jogar dois dados, a incerteza associada a sair 3 em um dado e sair 2 no outro dado deve ser a soma das incertezas de cada dado separadamente, enquanto a probabilidade de saírem esses dois números é dada pelo produto das probabilidades de cada evento individualmente. Assim,

$$p_{ij}^{(A \cup B)} = p_i^{(A)} p_j^{(B)} \quad (1.46)$$

$$I_1(p_i^{(A)} p_j^{(B)}) = I_1(p_i^{(A)}) + I_1(p_j^{(B)}) \quad (1.47)$$

Shannon provou que a única função que satisfaz a essas condições que estamos procurando é

$$I_1(p_i) = -k \ln p_i \quad (1.48)$$

Sendo k uma constante positiva que define a unidade de medida da incerteza. A incerteza S_1 é dada pela mesma expressão da entropia de Boltzmann- Gibbs na forma discreta $S_1 = -k \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i$. Percebemos assim, a interpretação da Entropia como uma medida da incerteza, ou a desinformação, associada a um conjunto de eventos.

Segundo PINEDA (2006, p.9) foi possível demonstrar formalmente como “quantizar” informação obtida de fontes contínuas, fornecendo as bases teóricas para a convergência digital, que no início do século XXI começa a se consolidar. Nessa perceptiva, temos os trabalhos de Nyquist (1924) recomendando uma quantificação dos dados telegráficos e de Hartley (1928) delimitando a imaginação de informação e sugerindo sua medida por meio de uma função logarítmica. Segundo NASCIMENTO (2018, p.6), o esforço de Warren Weaver é essencial para ampliar os horizontes de aplicabilidades dos trabalhos de Shannon levando a Teoria Matemática da Comunicação a incluir um espectro grande de processos, como por exemplo comunicações: orais; músicas; fotografia; cinema e etc.

O modelo de um Sistema de Comunicação de acordo com o trabalho de SHANNON (1948), é um sistema do tipo indicado esquematicamente na Figura 1. Ele consiste essencialmente em cinco partes:

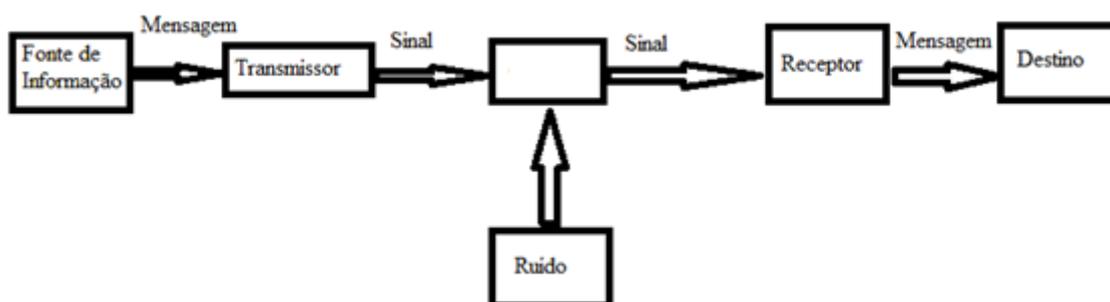


Figura 1. Diagrama de um sistema de comunicação extraída do SHANNON (1948).

1. Uma **fonte de informação** que produz uma mensagem ou sequência de mensagens a serem comunicadas ao terminal receptor. A mensagem pode ser de vários tipos: por exemplo: (i) Uma sequência de letras como em um sistema de telégrafo ou teletipo; (ii) Uma única função do tempo $f(t)$ como no rádio ou na telefonia; (iii) Uma função do tempo e outras variáveis como na televisão a preto e branco- aqui a

mensagem pode ser pensada como uma função $f(x, y, t)$ de duas coordenadas espaciais e temporal, a intensidade da luz no ponto (x, y) e tempo t na placa do tubo de captação.

2. Um **transmissor** que opera na mensagem de alguma forma para produzir um sinal adequado para transmissão através do canal. Sistemas de televisão e modulação de frequência são outros exemplos de operações complexas aplicadas à mensagem para obter o sinal.

3. O **canal** é meramente o meio usado para transmitir o sinal do transmissor para o receptor. Pode ser um par de fios, um cabo coaxial, uma banda de frequências de rádio, um feixe de luz, etc

4. O **receptor** ordinariamente executa a operação inversa daquela feita pelo transmissor, reconstruindo a mensagem do sinal.

5. O **destino** é a pessoa (ou coisa) para quem a mensagem é pretendida. O processo de transmissão da mensagem fica expostas as interferências de diversas naturezas, as quais podem comprometer os sinais enviados: tais interferências são denominadas de ruídos.

Conforme argumenta PINEDA (2006, p. 77), partindo deste modelo, Shannon começa pelo canal Discreto sem ruído ao qual servirá de estudo para outros casos semelhantes ou não iguais a este. Shannon continua, argumentando que um processo ergódico² deve ser examinado de maneira probabilística, levando em conta as probabilidades de ocorrência dos possíveis eventos. Nesta perspectiva, a quantidade de informação surgida por um processo ergódico deve somar todas as probabilidades, ao qual descreveremos por p , de ocorrência de evento, sendo o produto pelo seu próprio logaritmo. Sendo essa média expressa pela equação seguinte:

$$H = -k \sum_{i=1}^n p_i \log p_i \quad (1.49)$$

que é a Entropia de Fonte Discreta, em que k é uma constante arbitrária que expressa a unidade de medida. Esta medida calcula a quantidade média de informação por sinal de um repertório, o que implica que a adição de todas as probabilidades p_i é igual a 1.

Shannon percebeu que as equações deste tipo traz um sentido significativo na Teoria da Informação, e que posteriormente esta forma da quantidade de H seria

² Designa por função ergódica a função de fase que satisfaz à hipótese ergódica, isto é, tem média no tempo igual a média de fase. Mais detalhes de ergodicidade o Leitor pode utilizar a referência do LAGE (1995).

conhecida como a Entropia da Mecânica Estatística. Nesta perspectiva, o conceito de Entropia designa a quantidade de informação.

Olhando o caso mais singular da ocorrência de um evento com duas possibilidades, onde as probabilidades são dadas por $p + q = 1$, com p e $q = 1 - p$. A Entropia neste sistema fica dado por

$$H = -(p \log_2 p + q \log_2 q)$$

Graficamente H pode ser representado como indicado na figura 2.

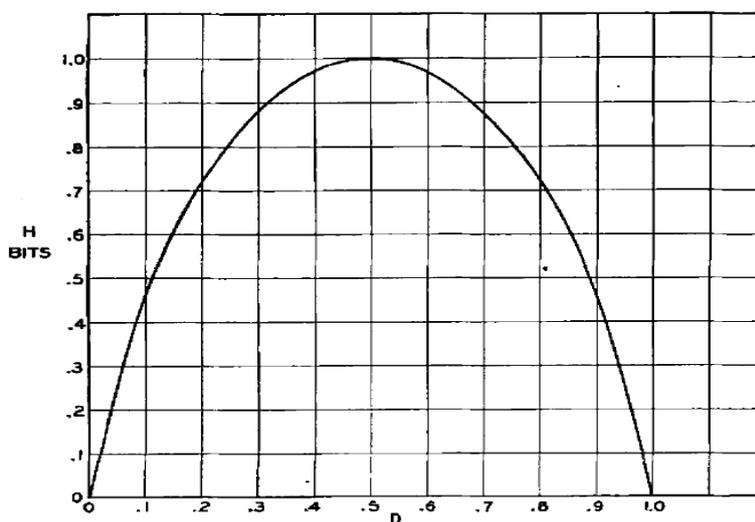


Figura 2. Entropia no caso de duas possibilidades com probabilidades p e $(1-p)$. Imagem ilustrativa obtida do SHANNON (1948).

As constatações de Shannon com base na Figura 2, foram: A Entropia máxima se evidencia quando as possibilidades são equiprováveis, a incerteza é maior quanto maior for a diferença entre as probabilidades, o que caracteriza menor Entropia. A Entropia só será zero se a probabilidade for 100%.

No entendimento de NASCIMENTO (2018, p. 10), este gráfico pode ser interpretado da seguinte forma, como ilustra a Figura 3:

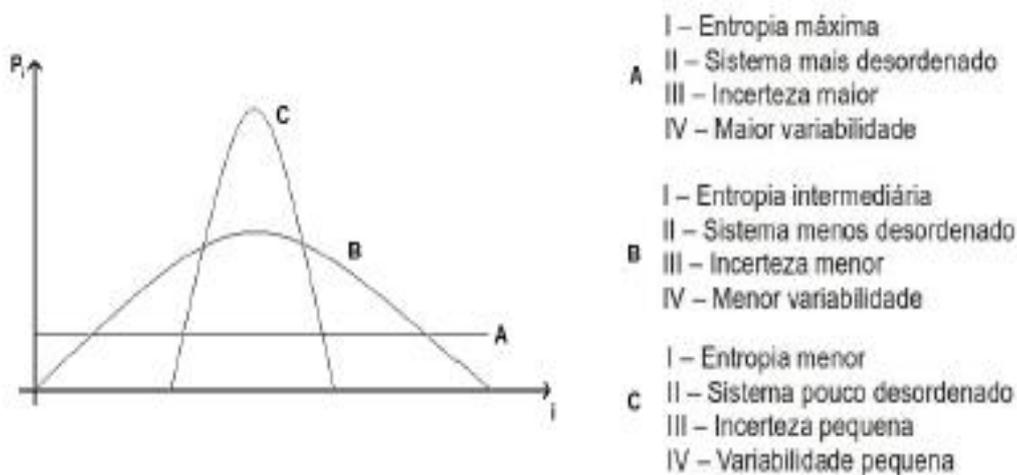


Figura 3. Distribuição de probabilidade referente aos sistemas pictóricos A, B e C.
 Figura extraída da Tese de NASCIMENTO (2018.p. 10).

No sistema A, a distribuição de probabilidade é equiprovável, ou seja, todos os eventos i tem igual probabilidade de ocorrer, sendo máxima a variabilidade do sistema, bem como a quantidade de informações, incerteza e entropia em relação aos outros sistemas.

No sistema B, a existência de uma tendência à ocorrência de certo evento i em relação a outros. Desta maneira a variabilidade do sistema é menor, a consequência disso é que, possui menor quantidade de informação, incerteza e entropia em relação ao primeiro sistema.

O sistema C é um caso limite dos três sistemas em que a tendência de ocorrência de determinados eventos é maior, assim sendo a variabilidade do sistema é menor, da mesma maneira que a informação, incerteza e entropia em comparação aos outros sistemas.

Podemos reescrever a Equação (1.49) na seguinte equação.

$$S(p_i) = - \sum_{i=1}^n p_i \log_2(p_i) \quad (1.50)$$

Ela continua sendo Entropia no caso discreto. Nos trabalhos na área de sistemas de comunicação o bit é a unidade informacional que geralmente é utilizada, ela provém da definição da base 2 para a função logarítmica e na prática representa uma escolha de dois eventos NASCIMENTO (2018. p. 8).

No caso em que a fonte informacional trabalha de maneira contínua uma equação equivalente a equação (1.50) é:

$$S(p(x)) = - \int_{-\infty}^{\infty} p(x) \log_2 p(x) dx \quad (1.51)$$

Em que $p(x)$ é a densidade de probabilidade contínua, tendo as restrições de $\int_{-\infty}^{\infty} p(x) dx = 1$ e $p(x) \geq 0$.

Capítulo 2. Metodologia.

2.1 - Método do Elemento Finito.

Segundo LOTTI et.al. (2006), o Método do Elemento Finito (MEF) em 1956, com Turner, Clough, Martins e Topp, trabalhando em um projeto de aeronaves para a Boeing, propuseram um método de análise estrutural similar ao MEF, mais tarde, em 1960 estes autores utilizaram pela primeira vez o nome de Método do Elemento Finito, descrevendo-o. Desde então, seu desenvolvimento teve aplicabilidade em diversas áreas da Engenharia, Medicina, Odontologia, Física e áreas correlatas. A viabilidade deste método tornou-se possível somente com o advento dos avanços Tecnológicos, aos quais englobam os computadores.

De acordo com RICCI (2005), a situação mais comum é quando desconhecemos o valor da função continua e queremos saber o quanto ela vale em certos pontos dentro de uma determinada região. A construção do modelo discreto do objeto contínuo denominaremos aqui por “domínio” é feita como descrito a seguir:

- 1) Um número finito de pontos é identificado no domínio, estes pontos são chamados pontos nodais ou nós.
- 2) O valor da função em cada nó é definida como variável a ser determinada.
- 3) O domínio é dividido em subdomínios, chamados “elementos”. Estes elementos estão conectados pelos nós comuns e junto aproximam a forma do domínio.
- 4) A função desejada é aproximada em cada elemento por um polinômio que é definido usando os valores da função nos nós. Um polinômio diferente é definido para cada elemento, mas estes são selecionados de forma a manter a continuidade ao longo das fronteiras dos elementos.

O autor citado anteriormente ainda fala que, MEF irá convergir na direção da solução correta no decorrer que a medida em que o tamanho dos elementos forem diminuindo, de modo que os valores das funções polinomiais gerem um valor constante ao longo dos elementos quando os valores nodais forem numericamente constantes.

A existência de um valor constante também implica do desaparecimento do gradiente de qualquer função (desejado no limite do tamanho mínimo de cada elemento).

De acordo com o RICCI (2005), o MEF tem sido amplamente utilizado em todos os problemas físicos que são essencialmente governado por equações diferenciais. Assim é possível apontar as vantagens e desvantagens desta técnica. As vantagens são:

- a) Esta propriedade permite que os elementos tenham tamanhos adaptados ao gradiente da função objeto, ou seja o comprimento dos elementos podem ser variados;
- b) As fronteiras irregulares podem ser aproximadas usando elementos com lados estreitos ou representadas com exatidão utilizando elementos com fronteiras curvilíneas;
- c) As propriedades dos materiais não precisam ser necessariamente os mesmos em elementos vizinhos, o que possibilita a utilização de corpos compostos por diversos materiais.

A grande desvantagem é a necessidade de computadores com uma grande quantidade de memória para solucionar os problemas complicados, como as enormes equações algébricas. No entanto, hoje com os computadores mais modernos esse problema foi quase solucionado.

Na área da Física Atômica e Molecular, o Método do Elemento Finito (MEF), segundo PRUDENTE (1999, p.114) e GUIMARÃES (2007, p. 52), procura dividir o espaço em elementos e expande a função de onda em termos de polinômios em cada um desses elementos. Uma vez que os elementos da matriz hamiltoniana e de superposição entre funções polinomiais de elementos finitos não- vizinhos serão nulos, as matrizes hamiltoniana e de superposição obtidas empregando-se o Método dos Elementos Finitos deverão ser esparsas e dominantes na diagonal, além de apresentar simetrias. Existem duas versões para o MEF: a versão-p e a versão-h, sendo que essa última versão usa polinômios de mesmo grau em todos os elementos da malha. Desta forma, a convergências depende do número de elementos em que o espaço é discretizado.

Na visão dos pesquisadores citados acima, a versão-p utiliza funções interpolantes lineares de forma como funções de base e permite usar polinômios de graus diferentes nos vários elementos, tendo uma maior flexibilidade. A convergência desta versão é obtida balanceando o número de elemento na malha e o grau dos polinômios nos elementos.

No nosso trabalho iremos utilizar a versão-p. Caso o leitor queira se aprofundar sobre a funções interpolantes lineares de forma, pode consultar a referência do AZEVEDO (2003).

2.2- Versão-p do Método do Elemento Finito.

Discutiremos agora a Versão-p do Método do Elemento Finito (MEF) pautado nos trabalhos do PRUDENTE (1999) e GUIMARÃES (2007), como foi dito na seção anterior, este método consiste em dividir o espaço em elementos e se expande a função de onda em termos dos polinômios para cada elemento da rede ou malha. Tomando o caso em uma dimensão, o intervalo de integração $[a, b]$ é dividido em N_e elementos, com i -ésimo tendo um intervalo de r_{i-1} até r_i com $r_0 = a$ e $r_{N_e} = b$, e a expansão de onda é expandida da seguinte forma:

$$\Psi(r) = \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j=0}^{k_i} c_j^i f_j^i(r), \quad (2.1)$$

Onde as funções de base $\{f_j^i(r)\}$ atendem a seguinte propriedade:

$$f_j^i(r) = 0 \quad \text{se} \quad r \notin [r_{i-1}, r_i] \quad (2.2)$$

Em termos de parâmetros k_i é a mais alta ordem dos polinômios associados com i -ésimo elemento, $f_j^i(r)$ é a j -ésima função de base do mesmo elemento e $\{c_j^i\}$ são os coeficientes da expansão.

Nos MEF, a versão p faz uso como base de funções interpolantes lineares e funções de forma. As duas funções interpolantes podem ser descritas como

$$Y_1^i(r) \equiv f_0^i(r) = \frac{r_i - r}{r_i - r_{i-1}} \quad \text{com} \quad r \in [r_{i-1}, r_i]$$

$$Y_2^i(r) \equiv f_{k_i}^i(r) = \frac{r - r_{i-1}}{r_i - r_{i-1}} \quad (2.3)$$

Enquanto as $k_i - 1$ funções de forma tem a seguintes definições

$$S_j^i(r) \equiv f_j^i(r) = (4j + 2)^{\frac{-1}{2}} [P_{j+1}(y^i) - P_{j-1}(y^i)], \quad \text{com} \quad j=1, \dots, k_i-1 \quad (2.4)$$

Em que $y^i = 2 \frac{r - r_{i-1}}{r_i - r_{i-1}} - 1$ e $P_j(y^i)$ são os polinômios de Legendre. Essas funções definidas em (2.3) e (2.4) obedecem às relações a seguir nos nodos dos elementos:

$$f_0^i(r_{i-1}) = 1 = f_{k_i}^i(r_i)$$

$$f_0^i(r_i) = 0 = f_{k_i}^i(r_{i-1})$$

$$f_j^i(r_{i-1}) = 0 = f_j^i(r_i) \quad \text{com } j=1, \dots, k_i-1 \quad (2.5)$$

É notório que baseado nas relações (2.5), a restrição da continuidade da função de onda nos nós da malha dos elementos nos remete à seguinte relação entre os coeficientes da expansão da equação (2.1):

$$c_{k_i}^i = c_0^{i+1} \quad i=1, \dots, N_e-1 \quad (2.6)$$

Fazendo a imposição que $f_{k_i}^i(r) + f_0^{i+1}(r)$ signifique uma única função que atua em dois elementos.

É possível notar que existe uma relação direta entre os coeficientes $\{a_k\}$ e os coeficientes $\{c_j^i\}$ mostrado abaixo, pois se consigo rescrever a equação (2.1) como indicadores globais consigo usar c_j^i :

$$a_k = c_j^i \Leftrightarrow k = (i-1)k_i + j + 1$$

A representação matricial \mathbf{B} de um operador local \hat{B} é obtida adotando-se o formalismo variacional. Utilizando a função de onda dada pela expansão da equação (2.1), em que as funções de base atendem a propriedade (2.2). Nestas circunstâncias os elementos não nulo da matriz \mathbf{B} são:

$$B_{jj'}^i = \int_{r_{i-1}}^{r_i} dr f_j^i(r) \hat{B} f_{j'}^i(r)$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}^1 & \mathbf{b}^1 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ (\mathbf{b}^1)^\dagger & \mathbf{B}^2 & \mathbf{b}^2 & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & (\mathbf{b}^2)^\dagger & \mathbf{B}^3 & \mathbf{b}^3 & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & (\mathbf{b}^3)^\dagger & \ddots & \ddots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \mathbf{B}^{N_e} & \mathbf{b}^{N_e} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & (\mathbf{b}^{N_e})^\dagger & \mathbf{B}^{N_e+1} \end{bmatrix}$$

Em que

$$\mathbf{B}^i = \begin{bmatrix} B_{K_i K_i}^{i-1} + B_{00}^i & B_{01}^i & \cdots & B_{0 K_i - 1}^i \\ B_{10}^i & B_{11}^i & \cdots & B_{1 K_i - 1}^i \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B_{K_i - 1 0}^{i-1} & B_{K_i - 1 1}^i & \cdots & B_{K_i - 1 K_i - 1}^i \end{bmatrix}$$

e

$$\mathbf{b}^i = \begin{bmatrix} B_{0 K_i}^i & 0 & \cdots & 0 \\ B_{1 K_i}^i & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B_{K_i - 1 K_i}^i & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}$$

Onde $i = 1, \dots, N_e$ e

$$\mathbf{B}^{N_e + 1} = B_{K_{N_e} K_{N_e}}^{N_e}$$

É notório que adotando-se o Método do Elemento Finito, a matriz \mathbf{B} é espaçada, e concentra-se mais na diagonal principal e apresenta uma estrutura de blocos. É importantes notar as seguintes observações:

- 1) Se o operador \hat{B} for hermitiano, a matriz \mathbf{B} também será hermitiano.
- 2) Somente uma função de base é diferente de zero no último nó da malha. Com isso o confinamento espacial sobre a função de onda $\chi_l(r)$ é imposto com uma maior facilidade utilizando a p-MEF fazendo apenas a remoção da função de base $f_{K_i}^{N_e}(r)$ da equação (2.1).
- 3) O requerimento da continuidade da função de onda na origem impõe que retiremos a função $f_0^1(r)$ da expansão. Assim, para o átomo de hidrogênio a dimensão das matrizes hamiltoniana e superposição constituirá $(N_e \cdot K_i - 1) \times (N_e \cdot K_i - 1)$, enquanto que para o ponto quântico a dimensão das matrizes será $(N_e \cdot K_i - 1) \cdot n \times (N_e \cdot K_i - 1) \cdot n$, sendo n o número de harmônicos esféricos utilizados na expansão da função de onda radial.

2.3- Procedimento Mecânico Quântico Auto-Consistente.

Ao trabalhar com o Método do Elemento Finito é fundamental a escolha do tamanho de cada elemento da malha em uma dimensão ou então a distribuição dos nós que definem estes elementos na malha. Simplesmente, a mesma pode ser obtida fazendo uma discretização equidistante nos nós, com:

$$r_i = a + i \frac{(b-a)}{N_e} \quad , \text{ em } \quad \{r_i, i = 0, \dots, N_e\} \quad (2.7)$$

No entanto, em muitas situações é preciso uma malha otimizada para ter-se uma melhor convergência dos dados coletados com um número menor de funções de base. Uma modificação proposta por PRUDENTE; SOARES (1999) denominada de “Procedimento Mecânico Quântico” para construir malhas otimizadas para cada potencial. Esse método faz uso de funções ortonormais para construção de quadratura gaussiana associado a ele, em que os pontos nessa quadratura podem ser considerados como sendo os autovalores do operador posição numa base de funções ortonormais.

A sequência do Procedimento Mecânico Quântico Auto-consistente é dado, segundo GUIMARÃES (2007, p. 56), por:

- a) Calcula-se um conjunto de autofunções $\phi_i(r)$ do sistema molecular em questão usando a versão-p do Método dos Elementos Finitos com uma dada malha, que de início pode ser discretizada uniformemente.
- b) Fazendo o uso das N_e-1 primeiras autofunções, arquitetada uma matriz em que os elementos são

$$\{\mathbf{R}\}_{ij} = \int_a^b dr \phi_i^*(r) r \phi_j(r) \quad (2.8)$$

Em que \mathbf{R} é a matriz do operador posição \hat{R} .

- c) Faz-se a diagonalização da matriz \mathbf{R} e os relativos N_e-1 autovetores são os $r_1, r_2, r_3, \dots, r_{N_e-1}$, ou seja, os nós que dimensionam as bordas dos elementos.
- d) Fazer um teste de convergência analisando os autovetores de energia obtidos na malha anterior com a nova malha. Se a variação entre elas estiver fora de uma dada tolerância retorna para a letra “a)” para repetir o procedimento com a malha nova. Ao atingir a convergência pretendida, o processo é finalizado. Concluindo assim, a malha final.

2.4- Junção da Teoria da Informação e a Teoria Quântica.

A Teoria da Informação e a Entropia de Shannon nos remete a uma medida de incerteza de uma distribuição de probabilidade originada de uma fonte de informação, ela não tem como base teorias sobrevividas da física e possibilita ter aplicabilidade em situações em que a Entropia Estatística tem certas restrições.

Na Mecânica Quântica, Max Born , BORN, M (1968) fez a formulação que a função densidade de probabilidade no espaço das posições é representado por :

$$\rho(\vec{r}) d\vec{r} = |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} \quad (2.9)$$

A dimensão da equação (2.9) é o inverso da posição, ela descreve a probabilidade de encontrar uma partícula entre \vec{r} e $\vec{r} + d\vec{r}$, estando no estado $\psi(\vec{r})$. A junção da Teoria da Informação e a Teoria Quântica acontece quando, temos uma distribuição contínua da densidade de probabilidade $\rho(\vec{r})$ provida pela função de onda do sistema no espaço das posições. Assim, para um sistema contínuo temos:

$$S_r = - \int \rho(\vec{r}) \ln(a_0^D \rho(\vec{r})) d\vec{r} = - \int |\psi(\vec{r})|^2 \ln(a_0^D |\psi(\vec{r})|^2) d\vec{r} \quad (2.10)$$

A equação (2.10) é conhecida como Entropia de Shannon no Espaço das Posições, ela mede a incerteza na localização de uma partícula no espaço Euclidiano, a_0 é o raio de Bohr e estamos considerando igual a 1, D é a dimensão no espaço das posições. No nosso caso estamos trabalhando em três dimensões, logo D = 3.

Para encontrarmos a representação no espaço dos momentos, devemos fazer uma Transformada de Fourier na função de onda do espaço das posições $\psi(\vec{r})$, para obter sua representação no espaço dos momentos, e sua correspondente densidade de probabilidade $\varrho(\vec{p}) = |\tilde{\psi}(\vec{p})|^2$. Com esses argumentos ficamos com:

$$S_p = - \int \varrho(\vec{p}) \ln\left(\left(\frac{\hbar}{a_0}\right)^D \varrho(\vec{p})\right) d\vec{p} = - \int |\tilde{\psi}(\vec{p})|^2 \ln\left(\left(\frac{\hbar}{a_0}\right)^D |\tilde{\psi}(\vec{p})|^2\right) d\vec{p} \quad (2.11)$$

A equação (2.11) é denominada de Entropia de Shannon no Espaço dos Momentos, a mesma mensura a incerteza na predição do momento da partícula, \hbar é denominado constante de Plank e foi considerado nesta dissertação igual a 1.

Com base na Mecânica Quântica, a medida de dois observáveis A e B só é possível fazer respeitando o Princípio de Incerteza Generalizado, dado pela equação (2.12) abaixo.

$$(\Delta_{\psi}A)(\Delta_{\psi}B) \geq \frac{1}{2} \int \psi^*(\vec{r}) [A, B] \psi(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.12)$$

Adaptando tal equação para nosso problema de observáveis de posição \vec{r} e momento \vec{p} , chegamos em:

$$(\Delta_{\psi}r)(\Delta_{\psi}p) \geq \left(\frac{\hbar}{2}\right) \quad (2.13)$$

A inequação (2.13) é chamada de Princípio da Incerteza de Heisenberg, o significado físico dela é que não é possível mensurar simultaneamente posição e o momento de uma partícula com máxima exatidão.

Fazendo a soma da Entropia do Espaço das Posições com a Entropia no Espaço dos Momentos ficamos com a equação abaixo que é conhecida como Relação de Incerteza Entrópica, segundo NASCIMENTO (2018, p. 12) .

$$S_t = - \int \rho(\vec{r}) \varrho(\vec{p}) \ln(\hbar^D \rho(\vec{r}) \varrho(\vec{p})) d\vec{p} d\vec{r} \geq D (1 + \ln(\pi)) \quad (2.14)$$

Com a equação (2.14) é possível trabalhar de forma mais geral que a equação (2.13), D como foi dito anteriormente representa a dimensão no espaço das posições. Segundo NASCIMENTO (2016, p. 18), a relação de Incerteza Entrópica tem o significado claro de apresentar um valor limite mínimo para a soma S_t , que são abordadas por funções de onda gaussianas. Ao plotarmos um gráfico, se tiver uma certa largura na distribuição de probabilidade do espaço das posições, em contra partida no espaço dos momentos será mais estreito e vice-versa. Fisicamente falando as equações (2.10), (2.11) e (2.14) são adimensionais.

As entropias S_r e S_p podem ser divididas em duas parcelas, uma radial $S(R_{nl})$ e a outra angular $S(Y_{lm})$ JIAO et.al., (2017), ou seja :

$$S_r = S(R_{nl}) + S(Y_{lm}) \quad (2.15)$$

e

$$S_p = S(F_{nl}) + S(Y_{lm}) \quad (2.16)$$

A parcela angular é a mesma em ambas às coordenadas permanecendo inalterada com a mudanças do raio de confinamento JIAO et.al., (2017).

De acordo com YAÑEZ et.al., (1999), as equações (2.15) e (2.16) para uma partícula de três dimensões podem ser descritas como:

$$S(R_{nl}) = - \int r^2 R_{nl}^2(r) \ln a_0^D R_{nl}^2(r) dr \quad (2.17)$$

e

$$S(Y_{lm}) = - \int |Y_{lm}(\Omega)|^2 \ln |Y_{lm}(\Omega)|^2 d\Omega \quad (2.18)$$

Dá equação (2.18) podemos chegar na expressão:

$$S(Y_{lm}) = -\log\left(\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}\right) - \left(\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}\right) \int_{-1}^{+1} [P_l^m(t)]^2 \ln [P_l^m(t)]^2 dt \quad (2.19)$$

Na equação (2.17) temos a contribuição da parte radial e na equação (2.18) temos a contribuição da parte angular, na equação (2.19) $P_l^m(t)$ é a Função de Legendre. As restrições dadas é que a equação (2.17) não pode ser calculada sem conhecer a forma específica do potencial, já a equação (2.18) não depende do potencial para que possa ser avaliada.

De acordo com JIAO et.al., (2017) a contribuição do Momento Linear fica:

$$S(F_{nl}) = - \int p^2 |F_{nl}(p)|^2 \ln |F_{nl}(p)|^2 dp \quad (2.20)$$

Em que de acordo com GOLDMAN, JOSLIN (1992), $F_{nl}(p)$ é dado pela expressão:

$$F_{nl}(p) = \int_0^{r_c} r^2 j_l(p_r) R_{nl}(r) dr \quad (2.21)$$

Em que $j_l(p_r)$ é a função de Bessel Esférica. Substituindo a equação (2.21) na equação (2.20) ficamos.

$$S(F_{nl}) = - \int p^2 \left| \int_0^{r_c} r^2 j_i(p_r) R_{nl}(r) dr \right|^2 \ln \left| \int_0^{r_c} r^2 j_i(p_r) R_{nl}(r) dr \right|^2 dp \quad (2.22)$$

A Incerteza Entrópica da equação (2.14) pode ser restrita em

$$S_t = S_r + S_p \geq D (1 + \ln(\pi)) \quad (2.23)$$

A relação de incerteza da equação (2.23) é conhecida como relação BBM uma vez que Iwo Bialynicki- Birula e Jerzy Mycielski provaram essas relações. Como estamos trabalhando em um problema de três dimensões, logo $D=3$ e substituindo esse valor na equação (2.23) encontramos que a nossa Incerteza Entrópica para o Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) é $S_t \geq 3 (1 + \ln(\pi)) = 6,4341$.

Capítulo 3- Resultados e Discussões.

No presente capítulo são apresentados os dados obtidos, e suas análises, para o Átomo de Hidrogênio Confinado. Para isso, implementamos na linguagem computacional Fortran 77, o procedimento baseado no Método do Elemento Finito (MEF) para a solução do problema de auto-valor e auto-vetor generalizado. Os resultados obtidos para as Energias e as Entropias de Shannon são apresentados em tabelas e gráficos utilizando o Software Qtiplot.

Para tal cálculo, encontrar-se um funcional de energia. Em seguida, faz-se uma expansão na função de onda $\Psi(x)$ em conjunto finito de funções de base $\{f_i\}$ para achar as autofunções e os autovalores que minimiza o funcional de $J[\Psi, \Psi_S]$. Após algumas considerações, utilizando o potencial efetivo a partir da adição do momento angular, chega-se na matriz Hamiltoniana e na matriz Overlap, impondo a condição $\chi_l(0) = 0$ e $\chi_l(r_c) = 0$. No presente caso, as funções de base são definidas na versão -p do Método do Elemento Finito, que tem a eficiência em que a condição de contorno sobre o sistema confinado pode ser feita imediatamente sobre a função de onda pela retirada de uma função de base da expansão. Empregamos malhas equidistantes para o estabelecimento dos elementos. O sistema de unidades atômica (u.a.) foi utilizado neste trabalho (para detalhes sobre tal sistema ver no Apêndice A).

3.1- Átomo de Hidrogênio Livre.

Aqui são analisados os resultados referentes ao Átomo de Hidrogênio Livre, para mostrar que nossa implementação computacional obteve os valores equivalentes aos existentes na literatura (JIAO et.al., 2017). Para isso utilizamos o número quântico principal n variando de 1 até 4 e o número quântico associado ao momento angular total l variando de 0 até 3. Desta forma, obtemos a Entropia Radial de Shannon, $S(Rnl)$, e a Entropia do Momento Linear de Shannon, $S(Fnl)$, correspondentes as parcelas das equações (2.17) e (2.22). Na Tabela 1 estão disponíveis os valores encontrados para esses intervalos.

Tabela 1. Valores da Entropia Radial de Shannon S (Rnl) e a Entropia do Momento Linear de Shannon S (Fnl) para o Átomo de Hidrogênio Livre, $n \leq 4$ e $0 \leq l \leq n-1$ calculados pelas equações (2.17) e (2.22). Ref. S (Rnl) e Ref. S (Fnl) obtidos por JIAO et al., (2017).

n	l	Ref. S (Rnl)	S (Rnl)	Ref. S (Fnl)	S (Fnl)
1	0	1,6137	1,6137	-0,1092	-0,1092
2	0	5,5799	5,5799	-3,2886	-3,2886
2	1	5,1658	5,1658	-2,0567	-2,0567
3	0	7,8955	7,8955	-4,7193	-4,7193
3	1	7,7068	7,7068	-3,9880	-3,9880
3	2	7,3045	7,3045	-3,2738	-3,2738
4	0	9,5439	9,5439	-5,6768	-5,6760
4	1	9,4348	9,4348	-5,1624	-5,1626
4	2	9,2210	9,2210	-4,6356	-4,6358
4	3	8,8402	8,8402	-4,1690	-4,1690

Para o cálculo do Átomo de Hidrogênio Livre utilizamos para o número quântico associado ao momento angular (l) a variação de 0 até 3, o número de elementos da malha (N_e) igual a 50, o número de funções em cada elemento (k_i) igual a 5, o número total de pontos (NPT) igual a 80 com raio de confinamento (r_c) igual a 80u.a. e momento de confinamento (PC) igual a 60,5 u.a. Como podemos vê na Tabela 1 nossos resultados concordam com a literatura até quatro casas decimais após a vírgula restringindo os casos de: $n=4$ e $l=0$; $n=4$ e $l=1$ e $n=4$ e $l=2$, que difere na última casa decimal apresentada.

3.2-Entropia Angular de Shannon.

No propósito de encontrarmos a contribuição angular da Entropia de Shannon dadas pelas equações (2.19), como vimos na seção 2.4, verificamos que a mesma não depende do raio de confinamento. Na Tabela 2 são apresentados os valores obtidos no presente trabalho, para $l \leq 3$ e $|m| \leq 1$, e comparamos com os obtidos por JIAO et.al., (2017).

Tabela 2. Entropia Angular de Shannon para número quântico $l \leq 3$ e $0 \leq m \leq 3$ calculado pela Equação (2.19). Ref. S(Ylm) obtido do JIAO et.al., (2017).

l	m	Ref. S (Ylm)	S (Ylm)
0	0	2,5310	2,5310
1	0	2,0991	2,0991
1	1	2,4059	2,4059
2	0	2,0411	2,0411
2	1	2,2632	2,2632
2	2	2,2632	2,2632
3	0	2,0207	2,0207
3	1	2,1920	2,1920
3	2	2,2411	2,2411
3	3	2,1465	2,1465

No cálculo computacional da Entropia Angular de Shannon, o número quântico associado ao momento angular(l) variou de 0 até 3 e o número total de pontos para integrar a parte angular (NPTANG) foi igual a 96.

Como é possível observar na Tabela 2, os nossos resultados são confiáveis em quatro casas decimais após a vírgula com os resultados de JIAO et. al., (2017) que tomamos como referência.

Uma vez mostrado que nossa implementação computacional tem eficiência ao obter a: Entropia Radial de Shannon S (Rnl); Entropia do Momento Linear de Shannon S (Fnl) e a Entropia Angular de Shannon S (Ylm) que por sua vez vão corresponder a Entropia dos Espaços das Posições de Shannon e a Entropia dos Espaços dos Momentos de Shannon, que representam respectivamente as equações (2.15) e (2.16), passaremos a calcular alguns valores para o Átomo de Hidrogênio Confinado.

3.3- Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c).

3.3.1- Estado Fundamental ($n=1, l=0, m=0$).

Para o estudo do Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) utilizamos diversos valores para a distância de confinamento r_c : 0,1; 0,2; 0,5; 1,0; 2,0; 3,0; 5,0; 7,0; 10,0 e 12,0, para os quais são determinados os valores esperados das Energias (E), das Entropias de Shannon nos Espaços das Posições (S_r) e nos Espaços dos Momentos

(S_p), dadas, respectivamente, pelas Equações (2.15) e (2.16). Além disso, são determinados os valores da Soma Entrópica (S_t) através da relação (2.24). Na Tabela 3 apresentamos os valores encontrados S_r e S_p para esses raios de confinamento, descritos anteriormente, com o número quântico do momento angular orbital $l=0$, número quântico magnético $m=0$ e número quântico principal $n=1$.

Tabela 3. Valores das Entropias de Shannon do Espaço das Posições (S_r) e a Entropia de Shannon no Espaço dos Momentos (S_p) em função do raio de confinamento r_c : para o Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c). Como comparação, apresentamos os valores obtidos por JIAO et. al., (2017), identificado como referências de S_r e S_p . Todos os valores estão em unidade atômica (u.a.).

r_c	Ref. S_r	S_r	Ref. S_p	S_p
0,1	-6,2445	-6,2445	12,8536	12,8536
0,2	-4,1779	-4,1779	10,7787	10,7787
0,5	-1,4703	-1,4703	8,0472	8,0472
1,0	0,5290	0,5290	6,0114	6,0114
2,0	2,3967	2,3967	4,0993	4,0993
3,0	3,3164	3,3164	3,1801	3,1801
5,0	4,0174	4,0174	2,5244	2,5244
7,0	-	4,1339	-	2,4294
10,0	4,1446	4,1446	2,4219	2,4217
12,00	-	4,1447	-	2,4219

Para todos os cálculo realizados para a obtenção da Tabela 3, empregamos o número de elementos da malha (N_e) igual a 50 e o número de funções em cada elemento (k_i) igual a 5. Entretanto, para a convergência de Entropia de Shannon no Espaço dos Momentos (S_p), foi necessário utilizar diferentes valores máximos para o momento linear (PC). Por exemplo, $r_c=0,1$ u.a. , foi necessário utilizar PC=6800,0 u.a. , para r_c : 5,0 u.a. empregamos PC= 31,0u.a. , e para r_c : 10,0 u.a. foi utilizado PC= 10,9u.a.

Como podemos ver na Tabela 3, os nossos resultados concordam com os resultados da literatura até quatro casas decimais após a vírgula, excetuando-se o caso de $r_c = 10,0$ u.a. Nesta Tabela e na Figura 4, onde apresentamos S_r e S_p em função de r_c , vemos que os valores de S_r vão crescendo com o aumento de r_c , ou seja, quando a distância de confinamento aumenta a incerteza na localização da partícula aumenta. No

entanto, os valores de S_p diminuem com o aumento de r_c , ou seja, S_p decresce quando r_c dirige-se para grandes valores.

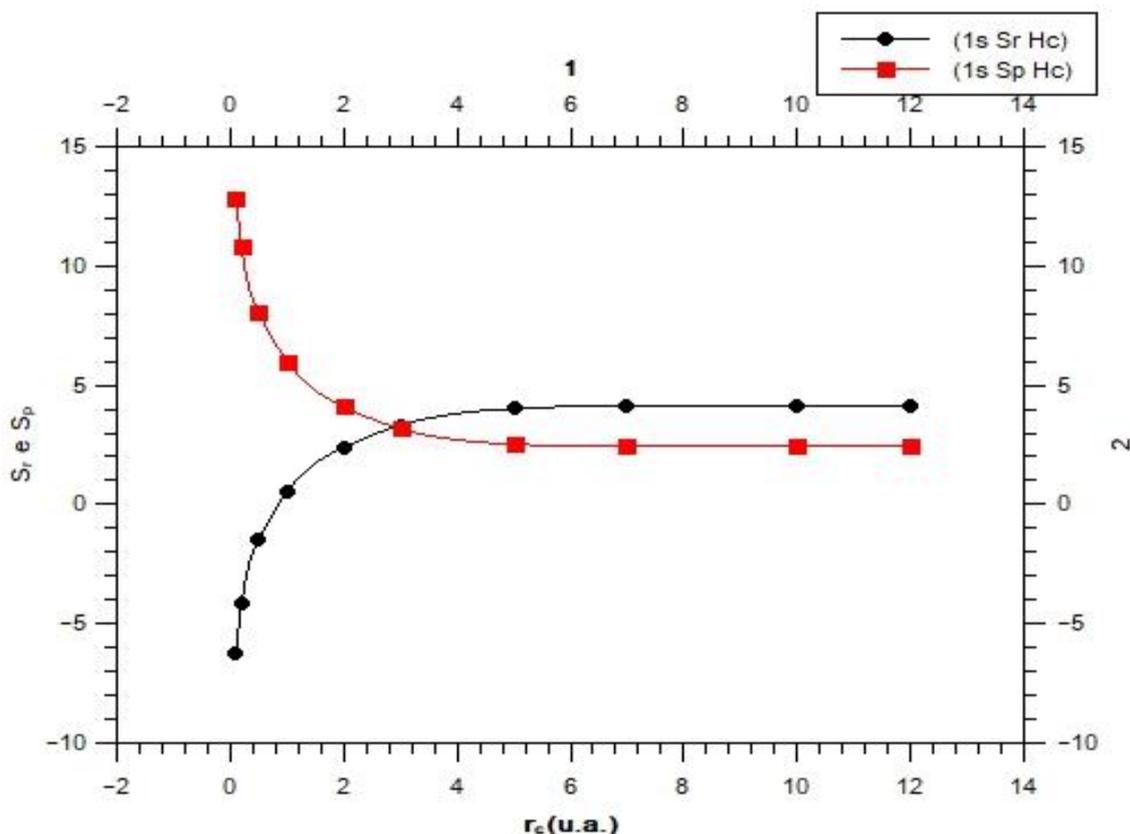


Figura 4. Entropia de Shannon no Espaço das Posições (S_r) e no Espaço dos Momentos (S_p) versus Raio de Confinamento (r_c), para: $l=0$, $m=0$ e $n=1$.

O ponto de interseção das curvas da Figura 4 para S_r e S_p é $(x, y) \approx (3,0033; 3,2184)$, o significado físico desse cruzamento é que as Incertezas das Posições e dos Momentos são as mesmas.

Na Tabela 4 apresentamos os valores da Energia (E) e Soma Entrópica (S_t) do estado fundamental do Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c), calculados na presente Dissertação, onde apresentam os valores obtidos por JIAO et.al., (2017).

Tabela 4. Valores da Energia (E) e da Soma Entrópica (S_t) em função do raio de confinamento para o Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c). Como comparação, são apresentados os valores obtidos por JIAO et.al., (2017), identificados com Ref. E e Ref. S_t .

r_c	Ref. E	E	Ref. S_t	S_t
0,1	468,9930	468,9930	6,6091	6,6091

0,2	111,0699	111,0699	6,6008	6,6008
0,5	14,7480	14,7480	6,5769	6,5768
1,0	2,3740	2,3740	6,5405	6,5404
2,0	-0,1250	-0,1250	6,4960	6,4960
3,0	-0,4240	-0,4240	6,4965	6,4965
5,0	-0,4964	-0,4964	6,5418	6,5418
7,0	-	-0,4999	-	6,5633
10,0	-0,5000	-0,5000	6,5665	6,5665
12,0	-	-0,5000	-	6,5666

Nota-se que na Tabela 4 os nossos resultados concordam com os valores da literatura até quatro casas decimais após a vírgula restringindo os casos de S_t com $r_c = 0,5$ u.a. e $r_c = 1,0$, que apresenta concordância em três casas decimais após a vírgula.

Na Figura 5, apresentamos os valores de S_t em função r_c para o Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c). Adicionalmente, os resultados da Soma Entrópica (S_t) para o estado fundamental de uma Partícula Confinada em uma Gaiola (identificada por e_c^-) são também apresentados. Os valores numéricos dessa qualidade estão na Tabela C.1 do Apêndice e são consistentes com os valores obtidos por NASCIMENTO (2018). Uma observação é que para e_c^- , o valor da Soma Entrópica não depende do raio de confinamento (r_c).

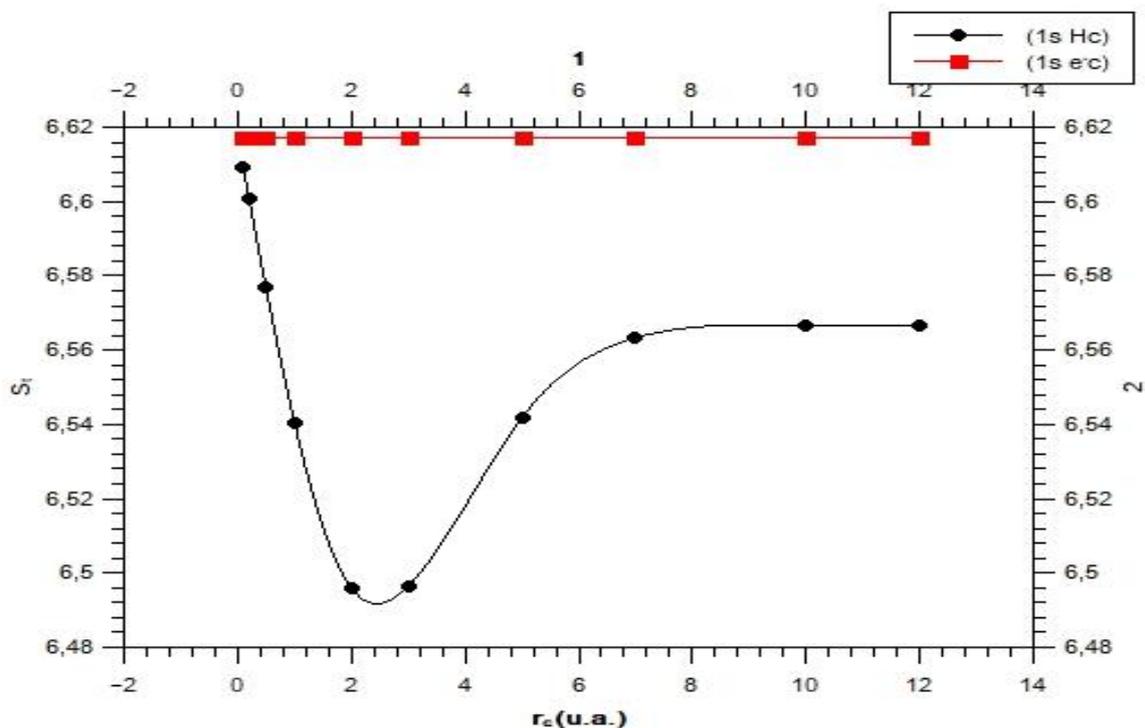


Figura 5. Soma Entrópica (S_t) versus Raio de Confinamento (r_c) para H_c e e_c^- .

É importante notar na Figura 5 que a intensificação da situação de confinamento, ou seja, quanto mais diminuirmos o raio de confinamento para o Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) a Entropia Total do Átomo de Hidrogênio (S_t) converge para a Entropia Total da Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (e_c^-). Isso sugere que o potencial coulombiano, ao confinar, deixa de ser importante e o Átomo de Hidrogênio passa a se comportar como um Elétron Confinado em uma Gaiola Esférica (e_c^-). De certa forma essa foi a pergunta explicitada no início da introdução desta Dissertação pelo artigo do JIAO et.al.,(2017). Assim, em regiões com forte confinamento o Átomo de Hidrogênio se comporta como uma Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica. Outras duas observações podem ser feitas: (i) quando r_c cresce, S_t tende para o valor do Átomo de Hidrogênio Livre; e (ii) para valores intermediários de r_c a curva de S_t atinge um mínimo.

Constata-se desta forma, que as variações de S_r e S_p respeitam o Princípio de Incerteza Entrópico, os valores de S_t encontrados na Tabela 4 estão acima dos valores mínimos permitidos que é 6,4341.

A seguir mostramos na Figura 6 a Energia (E) versus o raio de confinamento para o Átomo de Hidrogênio (H_c) da Tabela 4.

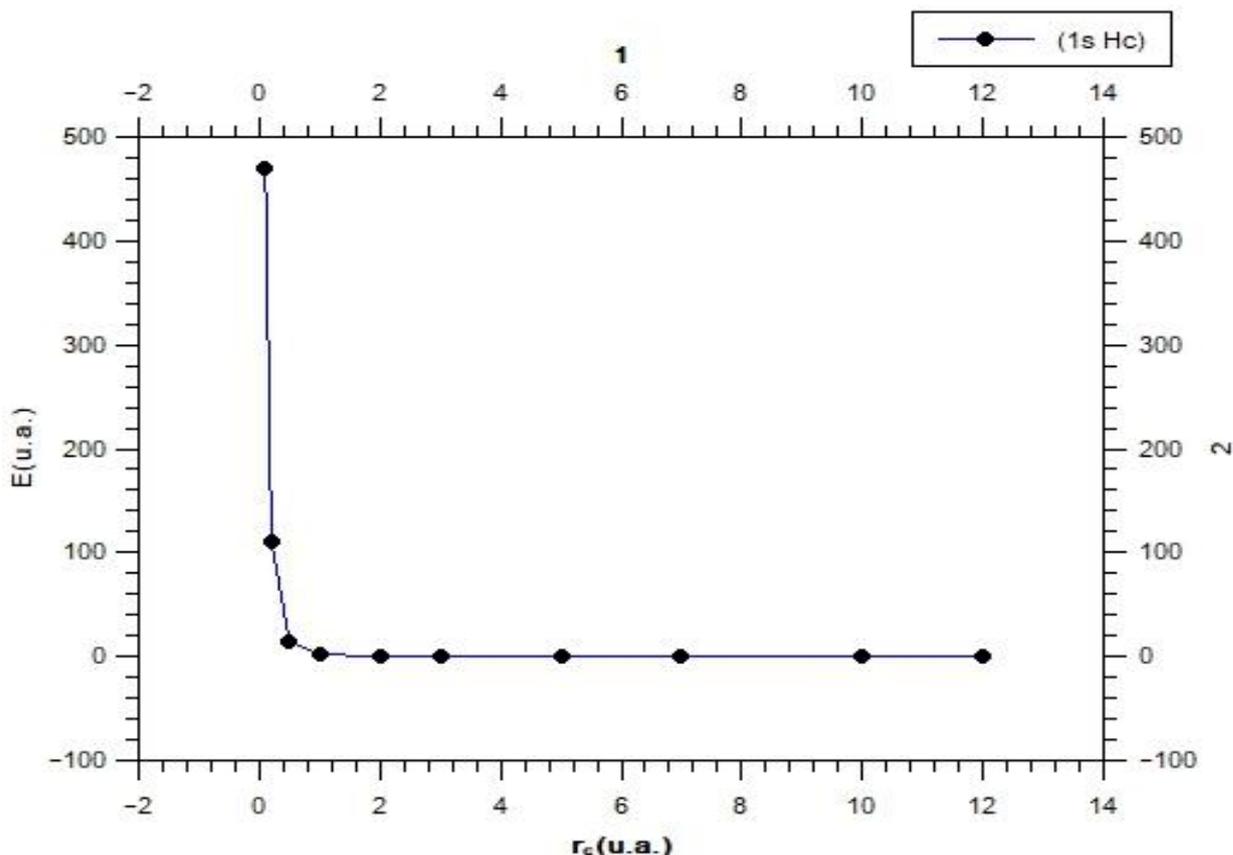


Figura 6. Energia (E) versus Raio de Confinamento (r_c) para 1s do Átomo de Hidrogênio confinado (H_c).

Analisando a Figura 6 da curva de cor azul para $1sH_c$, constatamos que os valores de E crescem com a redução de r_c , sofrendo uma forte inflexão quando a situação de confinamento aumenta. Quando o raio de confinamento (r_c) aumenta a Energia (E) de H_c vai para a Energia (E) do Átomo de Hidrogênio Livre.

3.3.2 Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) para o Momento Angular de $l=0$.

Na Tabela 5 estão dispostos os valores esperados da Energia (E) de S_r , S_p e S_t para diferentes valores de r_c e subnível s ($l=0$) para os quatro primeiros estados quânticos: 1s; 2s; 3s e 4s.

Tabela 5. Energia (E), Entropias de Shannon nos Espaços das Posições (S_r) e nos Espaços dos Momentos (S_p) e a Soma Entrópica (S_t) para os estados 1s, 2s, 3s e 4s do Átomo de Hidrogênio confinado (H_c) para diferentes raios de confinamento. Os valores estão em unidade atômica (u.a.).

1s				
r_c	E	S_r	S_p	S_t
0,10	468,9930	-6,2445	12,8536	6,6091
0,20	111,0699	-4,1779	10,7787	6,6009
0,50	14,7480	-1,4703	8,0472	6,5768
0,60	9,5277	-0,9382	7,5074	6,5692
1,00	2,3740	0,5290	6,0114	6,5404
2,00	-0,1250	2,3967	4,0993	6,4960
3,00	-0,4240	3,3164	3,1801	6,4965
4,00	-0,4833	3,7942	2,7241	6,5184
5,00	-0,4964	4,0174	2,5244	6,5418
7,00	-0,4999	4,1339	2,4294	6,5633
10,00	-0,5000	4,1446	2,4219	6,5665
12,00	-0,5000	4,1447	2,4219	6,5666
2s				
r_c	E	S_r	S_p	S_t
0,10	1942,7204	-6,4475	14,6388	8,1914
0,20	477,8517	-4,3692	12,5594	8,1902
0,50	72,6720	-1,6231	9,8124	8,1893
0,60	49,5847	-1,0767	9,2644	8,1877
1,00	16,5703	0,4555	7,7347	8,1902

2,00	3,3275	2,5503	5,6660	8,2163
3,00	1,1117	3,8084	4,4543	8,2627
4,00	0,4202	4,7330	3,5651	8,2980
5,00	0,1413	5,4642	2,8175	8,2816
7,00	-0,0513	6,5235	1,5659	8,0894
10,00	-0,1128	7,4462	0,2765	7,7227
12,00	-0,1214	7,7817	-0,2388	7,5429
3s				
r_c	E	S_r	S_p	S_t
0,10	4406,1217	-6,5222	15,5990	9,0768
0,20	1092,7127	-4,4424	13,5209	9,0786
0,50	170,5852	-1,6919	10,7784	9,0866
0,60	117,4747	-1,1442	10,2324	9,0882
1,00	40,8631	0,3919	8,7093	9,1012
2,00	9,3142	2,4862	6,6645	9,1507
3,00	3,7350	3,7261	5,4960	9,2221
4,00	1,8727	4,6204	4,6890	9,3094
5,00	1,0532	5,3267	4,0741	9,4008
7,00	0,3922	6,4150	3,1208	9,5358
10,00	0,0914	7,5878	1,9502	9,5380
12,00	0,0198	8,1874	1,2345	9,4220
4s				
r_c	E	S_r	S_p	S_t
0,10	7857,6292	-6,5611	16,2506	9,6896
0,20	1954,8815	-4,4809	14,1722	9,6913
0,50	308,1972	-1,7296	11,4278	9,6982
0,60	212,9623	-1,1818	10,8818	9,7000
1,00	75,1305	0,3546	9,3570	9,7116
2,00	17,8161	2,4466	7,3066	9,7533
3,00	7,4856	3,6796	6,1327	9,8123
4,00	3,9665	4,5628	5,3235	9,8863
5,00	2,3823	5,2553	4,7160	9,9713
7,00	1,0574	6,3162	3,8287	10,1450
10,00	0,4052	7,4642	2,8572	10,3214
12,00	0,2311	8,0579	2,3022	10,3601

Observando a Tabela 5 as energias do subnível s, constatamos que os valores de E crescem com a redução de r_c , sofrendo uma forte inflexão quando a situação de confinamento aumenta. Os valores de S_r vão crescendo com o aumento de r_c , ou seja, quando a distância de confinamento aumenta a incerteza na localização da partícula aumenta. No entanto, os valores de S_p diminuem com o aumento de r_c , ou seja, S_p decresce quando r_c dirige-se para grandes valores.

Os dados para a Energia (E) em função do raio de confinamento r_c nos estados: 1s; 2s; 3s e 4s do Átomo de Hidrogênio Confinado são apresentados na Figura 7.

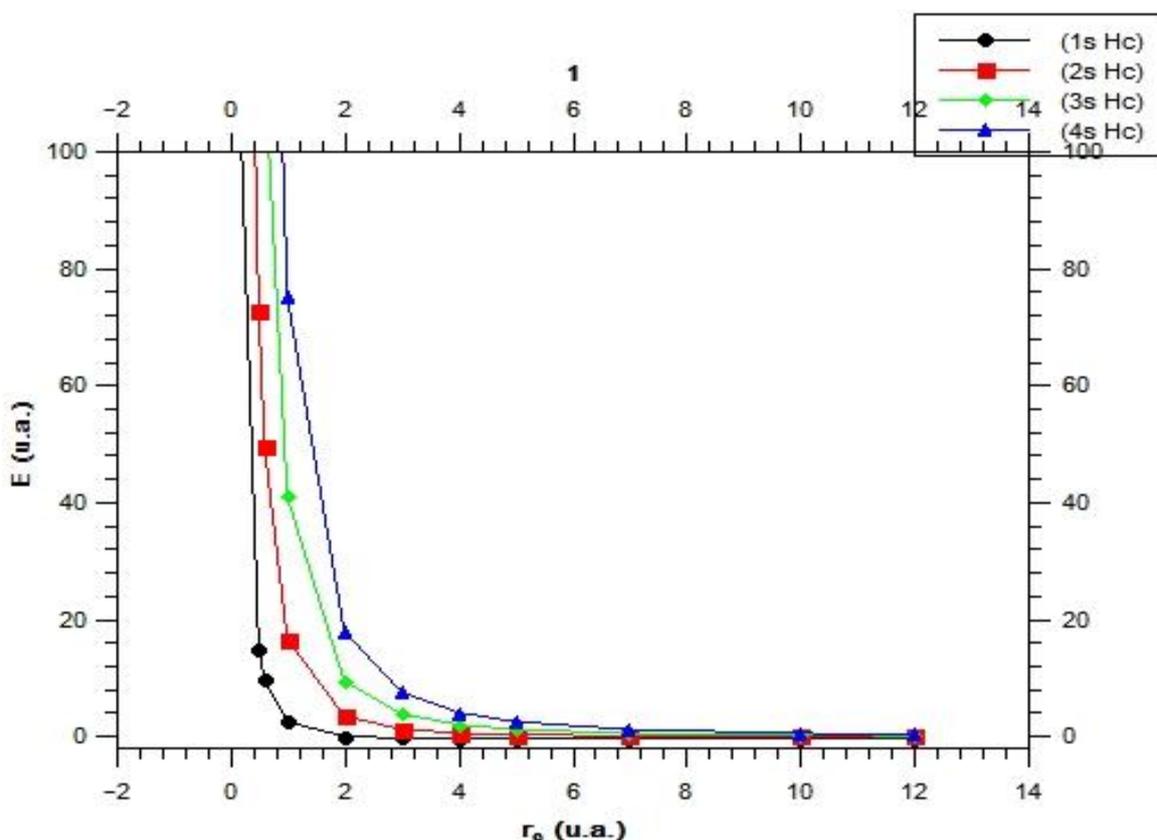


Figura 7. Energia versus Raio de Confinamento (r_c) para os estados 1s, 2s, 3s e 4s do H_c .

Observando a Figura 7, constatamos as inflexões das curvas quando os valores de r_c tornam-se pequenos, os valores esperados de energia crescem com o aumento do número quântico do sistema. Quando o raio de confinamento aumenta, a Energia (E) de H_c vai para a Energia (E) do Átomo de Hidrogênio livre.

Na Figura 8 apresentamos os gráficos de S_r e S_p para diferentes valores de r_c . Nesta figura podemos observar que S_r diminui com a restrição de r_c , ou seja, quando a distância de confinamento é reduzida a Incerteza na localização da partícula diminui. No entanto, os valores de S_p aumentam com a diminuição de r_c .

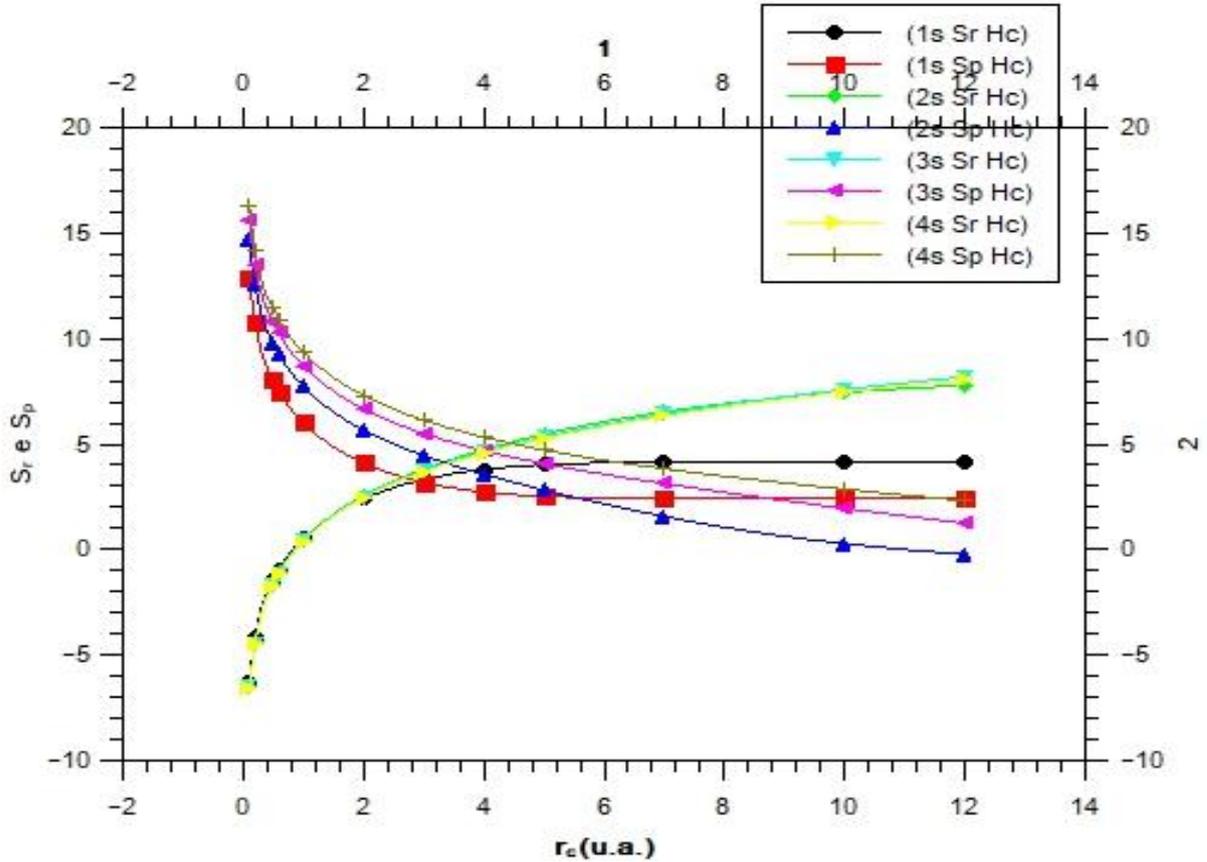


Figura 8. S_r e S_p versus Raio de Confinamento (r_c) para o subnível s da tabela 5.

Ainda analisando a Figura 8, as curvas S_r dos estados: 1s, 2s, 3s e 4s do H_c estão mais próximas quando r_c tende a zero, enquanto os valores de S_p para os mesmos estados: ficam mais afastados levando em consideração r_c tendendo a zero.

Os pontos de interseções em cada estado das curvas da Figura 5 para S_r e S_p em função de r_c (x, y) são:

$$1s S_r H_c \text{ com } 1s S_p H_c : (r_c, S_r=S_p) \approx (3,0033; 3,2184);$$

$$2s S_r H_c \text{ com } 2s S_p H_c : (r_c, S_r=S_p) \approx (3,3029; 4,1523);$$

$$3s S_r H_c \text{ com } 3s S_p H_c : (r_c, S_r=S_p) \approx (4,0326; 4,6552);$$

$$4s S_r H_c \text{ com } 4s S_p H_c : (r_c, S_r=S_p) \approx (4,5147; 4,9138).$$

O significado físico desses cruzamentos é que as Incertezas das Posições e dos Momentos são as mesmas para o estado em que o ponto é igual.

Na Figura 9 são apresentadas a Soma Entrópica S_t em função do raio de confinamento r_c para os quatro primeiros estados quânticos com $l=0$ (1s; 2s; 3s e 4s). É importante notar que com o aumento dos estados quânticos os valores de S_t aumentam.

Além disso, constata-se que as variações de S_r e S_p respeitam o Princípio de Incerteza Entrópica, para todos os valores de S_t encontrados na Tabela 5 e na Figura 9 estão acima do valor mínimo permitido que é de 6,4341.

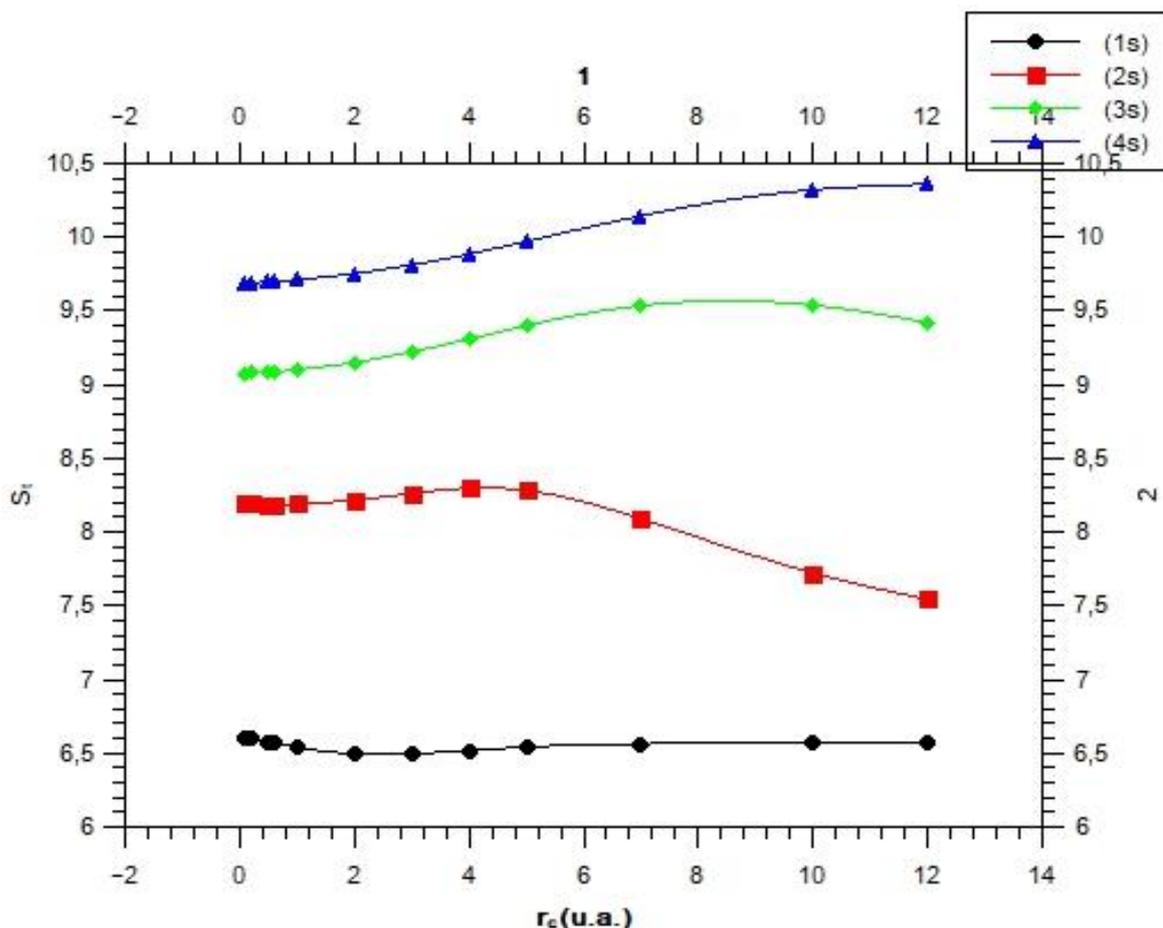


Figura 9. Soma Entrópica (S_t) versus Raio de Confinamento (r_c) para o subnível s.

Passamos a analisar individualmente a Soma Entrópica (S_t) do Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) com a Soma Entrópica (S_t) da Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (e_c^-) para os estados quânticos: 2s, 3s e 4s. Aqui omitimos o estado 1s pois sua análise foi apresentado na secção 3.3.1.

Na Figura 10 temos os valores de S_t para o estado 2s ($n=2, l=0$) do Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) e da Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (e_c^-). Os valores de E , S_r , S_p e S_t para a Partícula Confinada na Gaiola Esférica (e_c^-) são apresentados no Apêndice C. Em particular, para $l=0, n=2$, obtemos $S_t(e_c^-) = 8,1926$, cujo valor é muito próximo ao obtido por NASCIMENTO (2018). Nota-se que, para cada estado quântico, o valor de S_t é constante e independente do raio de confinamento como verificado por NASCIMENTO (2018). Neste caso, as duas curvas estão querendo

dizer que quanto mais diminuirmos o raio de confinamento para o Átomo de Hidrogênio (H_c) a Entropia Total (S_t) do Átomo de Hidrogênio converge para a Entropia Total (S_t) da Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (e_c^-). Ou seja o potencial coulombiano, ao confinar a partícula deixa de ser tão importante e o Átomo de Hidrogênio passa a se comportar como um Elétron Confinado em uma Gaiola Esférica (e_c^-), algo semelhante como vimos para 1s na secção 3.3.1.

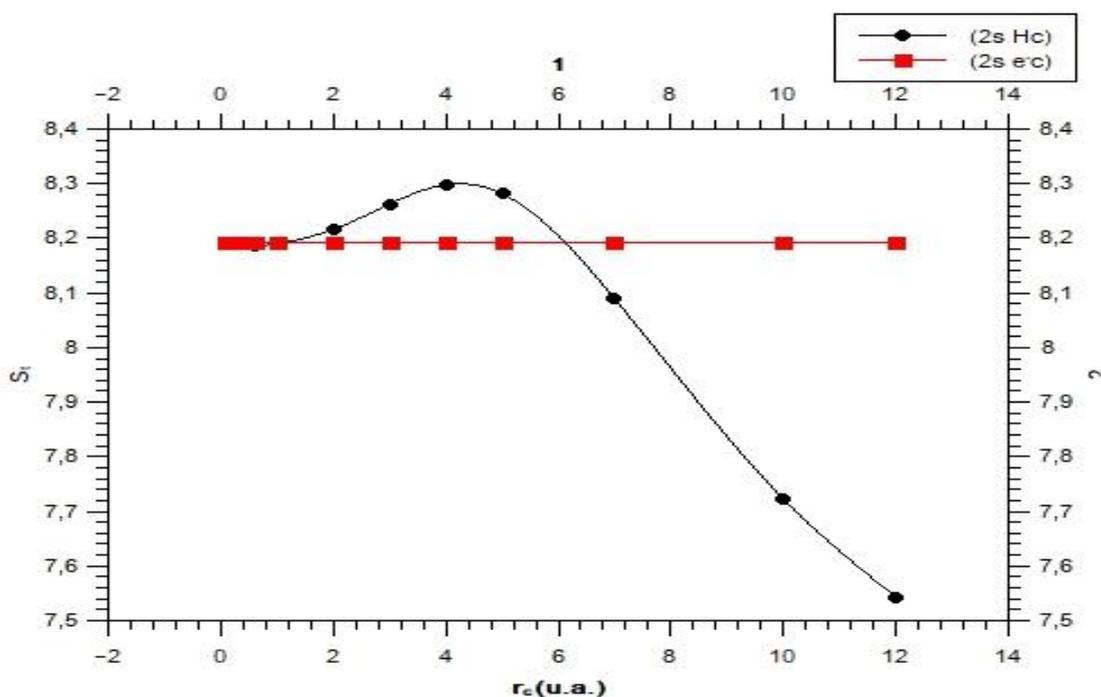


Figura 10. Soma Entrópica (S_t) versus Raio de Confinamento (r_c) para H_c e e_c^- para o estado quântico 2s.

Na Figura 11, abordamos a Soma Entrópica (S_t) em função do raio de confinamento (r_c) para o estado quântico: 3s dos sistemas H_c e e_c^- . Na Tabela C.1 temos $S_t e_c^- = 9,0744$, cujos valores coincidem com o da referência de NASCIMENTO (2018). As duas curvas estão querendo dizer que quanto mais diminuirmos o raio de confinamento para o Átomo de Hidrogênio confinado (H_c), a Entropia Total (S_t) do Átomo de Hidrogênio converge para a Entropia Total (S_t) da Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (e_c^-). Ou seja, o potencial coulombiano ao ser confinado rigorosamente, deixa de ser importante e o Átomo de Hidrogênio passa a se comportar como um Elétron Confinado em uma Gaiola Esférica (e_c^-). Algo semelhante vimos para o estado 1s na Figura 5 e para o estudo 2s na Figura 10.

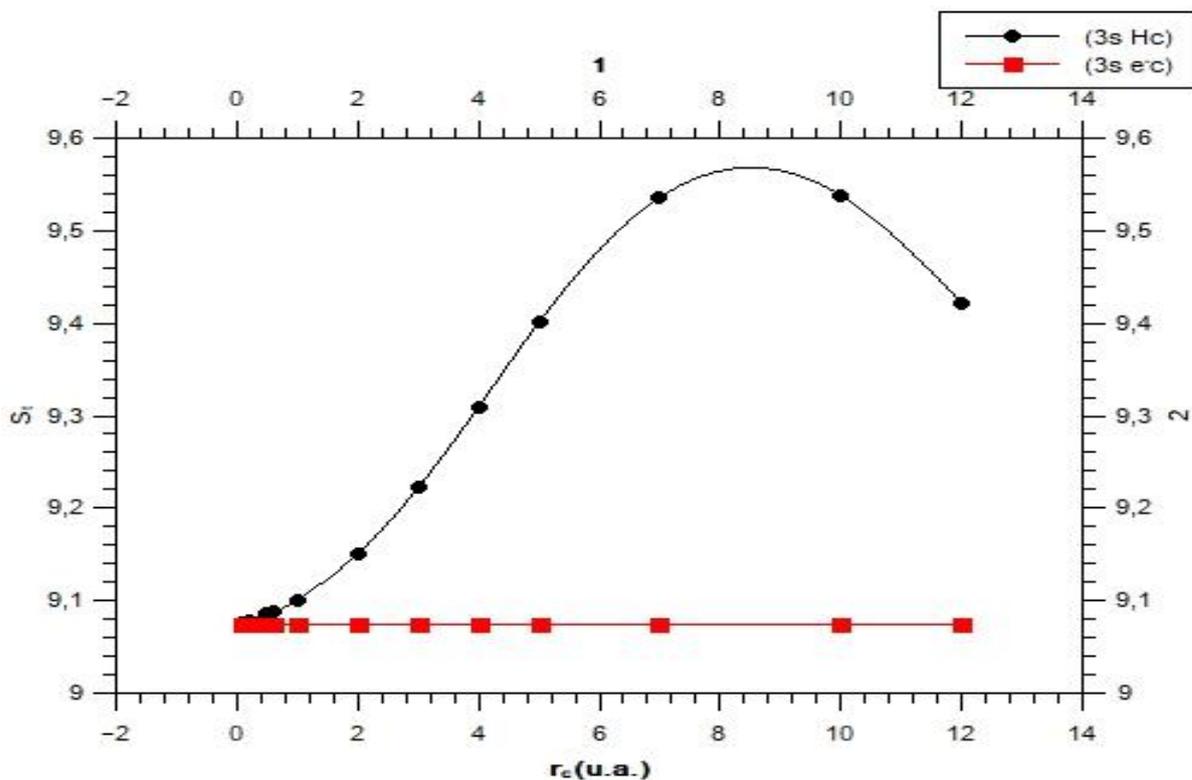


Figura 11. Soma Entrópica (S_t) versus Raio de Confinamento (r_c) para H_c e e_c^- utilizando o estado quântico 3s.

Para o estudo do estado quântico: $4sH_c$ e $4se_c^-$, precisamos das informações contidas na Tabela 5 em que $l=0$ e $n=4$, mais $S_t(e_c^-) = 9,6866$, que é o valor da Soma Entrópica encontrada na presente Dissertação para uma Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (e_c^-), seu valor está disponível na Tabela C.1. Na Figura 12 visualizamos os valores de S_t para o Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) e para a Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (e_c^-). Os dois gráfico estão nos dizendo que quanto mais diminuirmos o raio de confinamento (r_c) para o Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c), a Entropia Total (S_t) do Átomo de Hidrogênio converge para a Entropia Total (S_t) da Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (e_c^-), indicando que o potencial coulombiano, ao realizar um confinamento rigoroso, deixa de ser importante e o Átomo de Hidrogênio passa a se comportar como um Elétron Confinado em uma Gaiola Esférica (e_c^-), semelhante ao observado para os estados 1s, 2s e 3s mostrados nas Figura 5, 10 e 11, respectivamente.

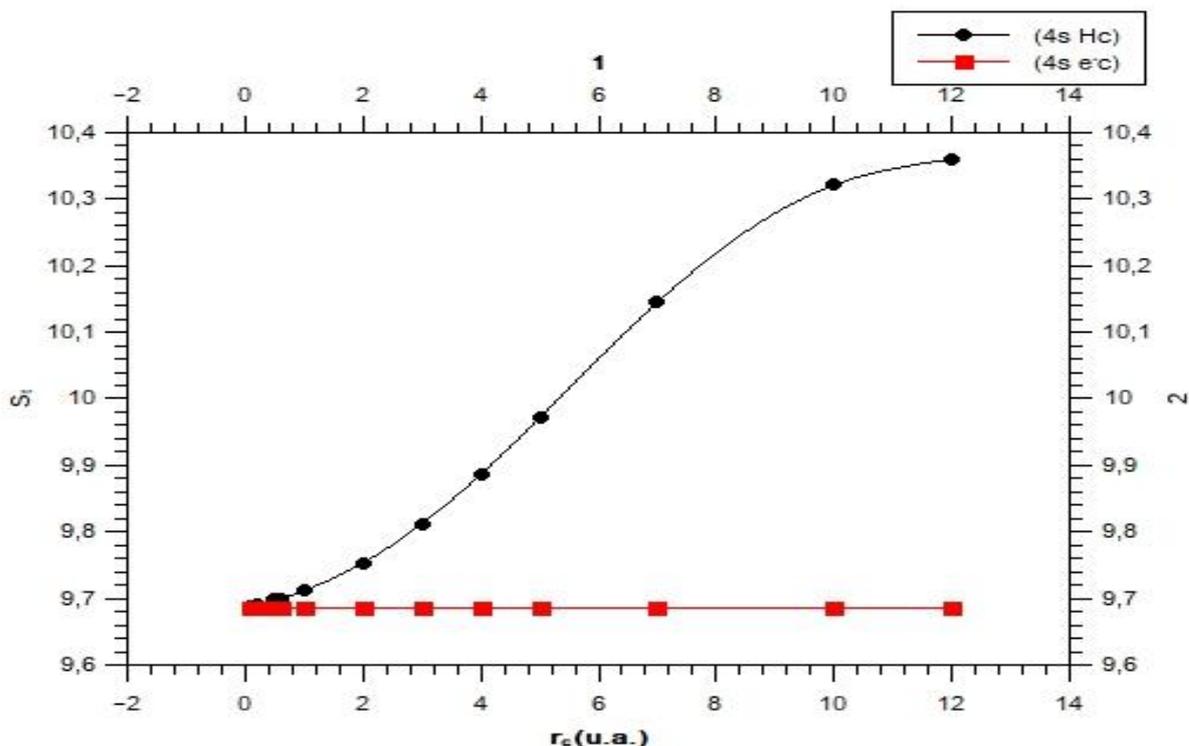


Figura 12. Soma Entrópica (S_t) versus Raio de Confinamento (r_c) para H_c e e_c^- utilizando o estado quântico 4s.

3.3.3- Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) para o Momento Angular de $l=1$.

Apresentamos agora uma discussão sobre os três primeiros estados com $l=1$, denominados de 2p, 3p e 4p. Salientamos que, neste caso, o módulo do número quântico azimutal $|m|$ pode assumir os valores de 0 ou 1. Os cálculos foram realizados usando os mesmos parâmetros de cálculos que os empregados no caso $l=0$. Na Tabela 6 são mostrados os valores da Energia (E), de S_r , S_p e S_t para diferentes valores de r_c de subnível p ($l=1$) para os três primeiros números quânticos: 2p; 3p e 4p do Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c).

Tabela 6. E , S_r , S_p e S_t para o subnível p do Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) para diferentes raios de confinamento. Na primeira entrada para cada r_c são apresentados os resultados para $m=0$, e na segunda entrada $|m|=1$. Todos os valores estão em unidade atômica (u.a.).

2p				
r_c	E	S_r	S_p	S_t
0,10	991,0076	-6,3897	13,4183	7,0286
0,10	991,0076	-6,0829	13,7252	7,6423
0,20	243,1093	-4,3127	11,3397	7,0270
0,20	243,1093	-4,0058	11,6465	7,6407
0,50	36,6589	-1,5712	8,5942	7,0230
0,50	36,6589	-1,2644	8,9011	7,6367
0,60	24,9369	-1,0268	8,0476	7,0208
0,60	24,9369	-0,7200	8,3544	7,6345
1,00	8,2231	0,4949	6,5198	7,0147
1,00	8,2231	0,8018	6,8266	7,6284
2,00	1,5760	2,5439	4,4580	7,0019
2,00	1,5760	2,8508	4,7648	7,6156
3,00	0,4813	3,7238	3,2691	6,9929
3,00	0,4813	4,0307	3,5760	7,6066
4,00	0,1435	4,5430	2,4469	6,9899
4,00	0,1435	4,8499	2,7538	7,6036
5,00	0,0076	5,1597	1,8359	6,9956
5,00	0,0076	5,4665	2,1428	7,6093
7,00	-0,0875	6,0300	1,0057	7,0357
7,00	-0,0875	6,3369	1,3126	7,6494
10,00	-0,1189	6,7838	0,3524	7,1363
10,00	-0,1189	7,0907	0,6593	7,7500
12,00	-0,1233	7,0437	0,1606	7,2044
12,00	-0,1233	7,3506	0,4675	7,8180
3p				
r_c	E	S_r	S_p	S_t
0,10	2960,4623	-6,6529	14,7285	8,0756
0,10	2960,4623	-6,3460	15,0353	8,6893
0,20	734,2292	-4,5743	12,6493	8,0750
0,20	734,2292	-4,2675	12,9562	8,6887
0,50	114,6436	-1,8282	9,9040	8,0759
0,50	114,6436	-1,5213	10,2109	8,6896
0,60	78,9560	-1,2821	9,3546	8,0725
0,60	78,9560	-0,9752	9,6614	8,6862
1,00	27,4740	0,2470	7,8244	8,0714
1,00	27,4740	0,5538	8,1313	8,6851
2,00	6,2690	2,3185	5,7529	8,0713
2,00	6,2690	2,6253	6,0597	8,6850
3,00	2,5162	3,5282	4,5489	8,0771
3,00	2,5162	3,8350	4,8557	8,6908

4,00	1,2615	4,3863	3,7032	8,0895
4,00	1,2615	4,6931	4,0100	8,7032
5,00	0,7077	5,0530	3,0563	8,1093
5,00	0,7077	5,3598	3,3632	8,7230
7,00	0,2578	6,0654	2,1070	8,1724
7,00	0,2578	6,3723	2,4138	8,7861
10,00	0,0492	7,1632	1,1249	8,2882
10,00	0,0492	7,4701	1,4318	8,9019
12,00	-0,0016	7,7370	0,5982	8,3352
12,00	-0,0016	8,0438	0,9050	8,9489
4p				
r_c	E	S_r	S_p	S_t
0,10	5918,1829	-6,7746	15,5146	8,7400
0,10	5918,1829	-6,4678	15,8215	9,3537
0,20	1472,8370	-4,6955	13,4357	8,7402
0,20	1472,8370	-4,3887	13,7426	9,3539
0,50	232,4280	-1,9475	10,6916	8,7441
0,50	232,4280	-1,6407	10,9985	9,3578
0,60	160,6602	-1,4009	10,1425	8,7417
0,60	160,6602	-1,0940	10,4494	9,3554
1,00	56,7580	0,1305	8,6129	8,7434
1,00	56,7580	0,4374	8,9197	9,3571
2,00	13,5106	2,2078	6,5440	8,7518
2,00	13,5106	2,5147	6,8508	9,3655
3,00	5,7004	3,4230	5,3425	8,7654
3,00	5,7004	3,7298	5,6493	9,3791
4,00	3,0339	4,2858	4,4990	8,7848
4,00	3,0339	4,5927	4,8058	9,3985
5,00	1,8304	4,9563	3,8540	8,8102
5,00	1,8304	5,2631	4,1608	9,4239
7,00	0,8192	5,9715	2,9085	8,8800
7,00	0,8192	6,2784	3,2153	9,4937
10,00	0,3161	7,0609	1,9624	9,0232
10,00	0,3161	7,3677	2,2692	9,6369
12,00	0,1797	7,6276	1,4962	9,1238
12,00	0,1797	7,9345	1,8031	9,7375

Da análise da Tabela 6, constatamos que, as variações de S_r e S_p respeitam o Princípio de Incerteza Entrópico, pois os valores de S_t encontrados estão acima do valor mínimo permitido que é de 6,4341. Adicionalmente, observamos que, como é de se esperar, os valores de Energia não dependem de m . Por outro lado, os valores de S_r , S_p e S_t variam com o número quântico azimutal m . Esta dependência é devido ao termo $S(Ylm)$, já que a função de onda radial (e portanto $S(Rnl)$ e $S(Fnl)$) não dependem de m .

Na Figura 13, apresentamos os valores esperados de energia (E) para os estados $2p$, $3p$ e $4p$ do H_c em função de r_c . Notamos que, quando r_c diminui, os valores das energias crescem e, para $r_c \rightarrow \infty$, os valores convergem para o Átomo de Hidrogênio Livre. Além disso, dado um r_c , os valores de energia aumentam quando o número quântico ($n=2$; $n=3$ e $n=4$) do sistema aumenta.

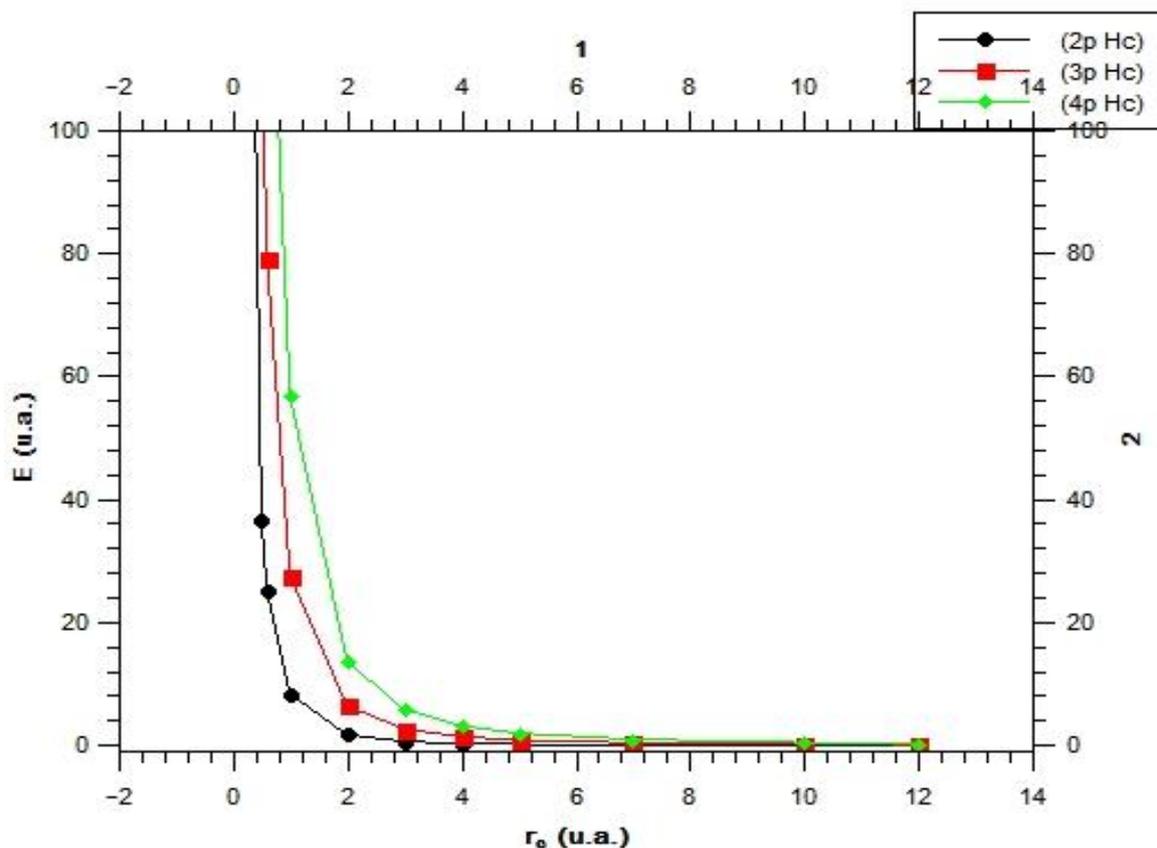


Figura 13. Energia versus Raio de Confinamento (r_c) para o subnível p.

Passaremos agora para o entendimento do comportamento da S_r e S_p em função de r_c , com a representação de seus valores na Figura 14, para os estados quânticos utilizados: $2p$; $3p$ e $4p$ ao quais chamaremos de: $2p_0$; $3p_0$ e $4p_0$ para o Átomo de Hidrogênio Confinado com $m=0$. Observamos nela que S_r diminui com a restrição de r_c , ou seja, quando a distância de confinamento é reduzida a Incerteza na localização da partícula diminui. Em contrapartida, os valores de S_p aumentam com a diminuição de r_c .

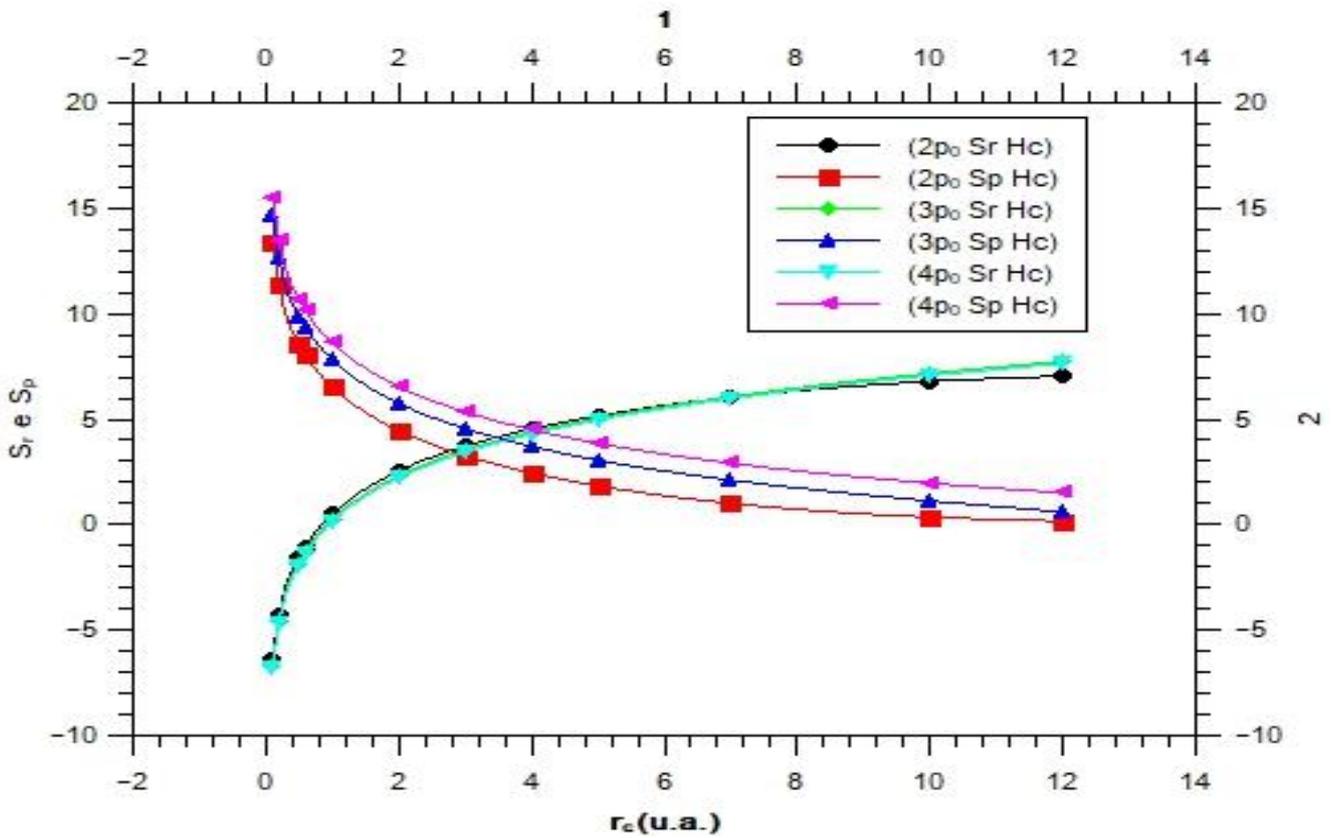


Figura 14. S_r e S_p versus Raio de Confinamento (r_c) para o subnível p ($m=0$).

Acompanhando as inflexões das curvas da Figura 14 para $m=0$, enquanto: $2p_0 S_r H_c$, $3p_0 S_r H_c$ e $4p_0 S_r H_c$ estão mais próximos quando r_c tende a zero, os valores de: $2p_0 S_p H_c$, $3p_0 S_p H_c$ e $4p_0 S_p H_c$ encontram-se mais separados tomando como referência à situação de r_c tendendo a zero.

Os pontos de interseções de cada estado das curvas da Figura 14 para S_r e S_p em função de r_c (x, y) são:

$$2p_0 S_r H_c \text{ com } 2p_0 S_p H_c: (r_c, S_r = S_p) \approx (2,7948; 3,5057);$$

$$3p_0 S_r H_c \text{ com } 3p_0 S_p H_c: (r_c, S_r = S_p) \approx (3,5505; 4,0517);$$

$$4p_0 S_r H_c \text{ com } 4p_0 S_p H_c: (r_c, S_r = S_p) \approx (4,1368; 4,3966).$$

Esses cruzamentos significam que fisicamente as Incertezas das Posições e dos Momentos para estes pontos são as mesmas.

Passaremos agora para o entendimento do comportamento da S_r e S_p em função de r_c , com a representação de seus valores na Figura 15, para os estados quânticos utilizados: $2p$; $3p$ e $4p$ ao quais chamaremos de: $2p_1$; $3p_1$ e $4p_1$ para o Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) com $|m|=1$. Observamos nela que S_r diminui com a restrição de r_c , ou seja, quando a distância de confinamento é reduzida a Incerteza na localização da partícula diminui. Em contrapartida, os valores de S_p aumentam com a diminuição de r_c .

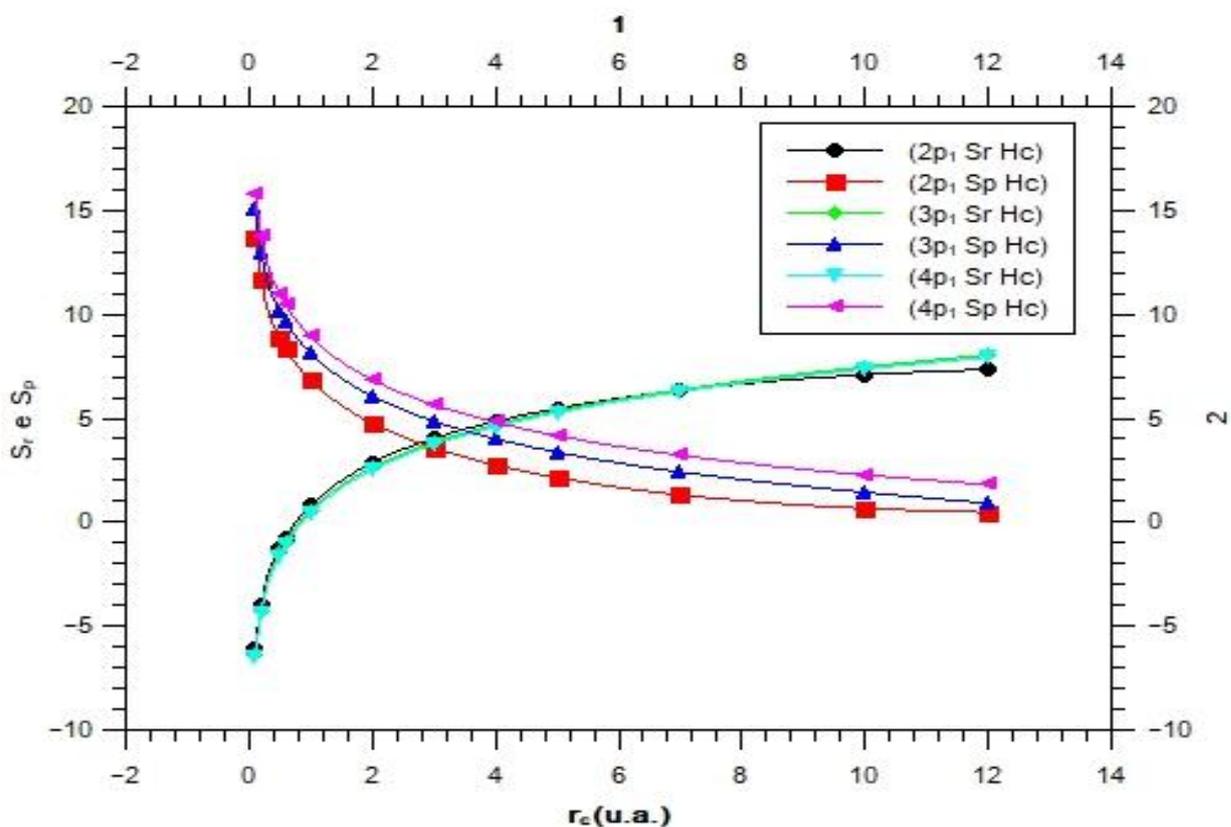


Figura 15. S_r e S_p versus Raio de Confinamento (r_c) para o subnível p ($|m|=1$), denotado nesta Dissertação por p_1 .

Acompanhando as inflexões das curvas da Figura 15 para $|m|=1$, enquanto: $2p_1 S_r H_c$, $3p_1 S_r H_c$ e $4p_1 S_r H_c$ estão mais próximos quando r_c tende a zero, os valores de: $2p_1 S_p H_c$, $3p_1 S_p H_c$ e $4p_1 S_p H_c$ encontram-se mais separados tomando como referência a situação de r_c tendendo a zero.

Os pontos de interseções de cada estado das curvas da Figura 15 para S_r e S_p em função de r_c (x, y) são:

$$2p_1 S_r H_c \text{ com } 2p_1 S_p H_c: (r_c, S_r = S_p) \approx (2,7948; 3,7931);$$

$$3p_1 S_r H_c \text{ com } 3p_1 S_p H_c: (r_c, S_r = S_p) \approx (3,6119; 4,3418);$$

$$4p_1 S_r H_c \text{ com } 4p_1 S_p H_c: (r_c, S_r = S_p) \approx (4,1957; 4,6882).$$

Esses cruzamentos significam que fisicamente as Incertezas das Posições e dos Momentos para estes pontos são as mesmas.

Passaremos agora para a Soma Entrópica (S_t) em função do raio de confinamento r_c , representando na Figura 16, os resultados para os estados quânticos $2p$, $3p$ e $4p$, tanto com $m=0$ e $|m|=1$, denotados por $2p_0$, $2p_1$, $3p_0$, $3p_1$, $4p_0$ e $4p_1$. Constata-se, desta forma, que as variações de S_r e S_p respeitam o Princípio de Incerteza Entrópico, pois os valores de S_t encontrado na Tabela 6 estão acima dos valores mínimos permitidos que de 6,4341 e os estados quânticos têm curvas distintas. Nota-se que com o aumento do estado quântico o valor da Soma Entrópica (S_t) aumenta, isso é perceptível nas curvas em: $2p_0 H_c$, $3p_0 H_c$, $4p_0 H_c$, $2p_1 H_c$, $3p_1 H_c$ e $4p_1 H_c$.

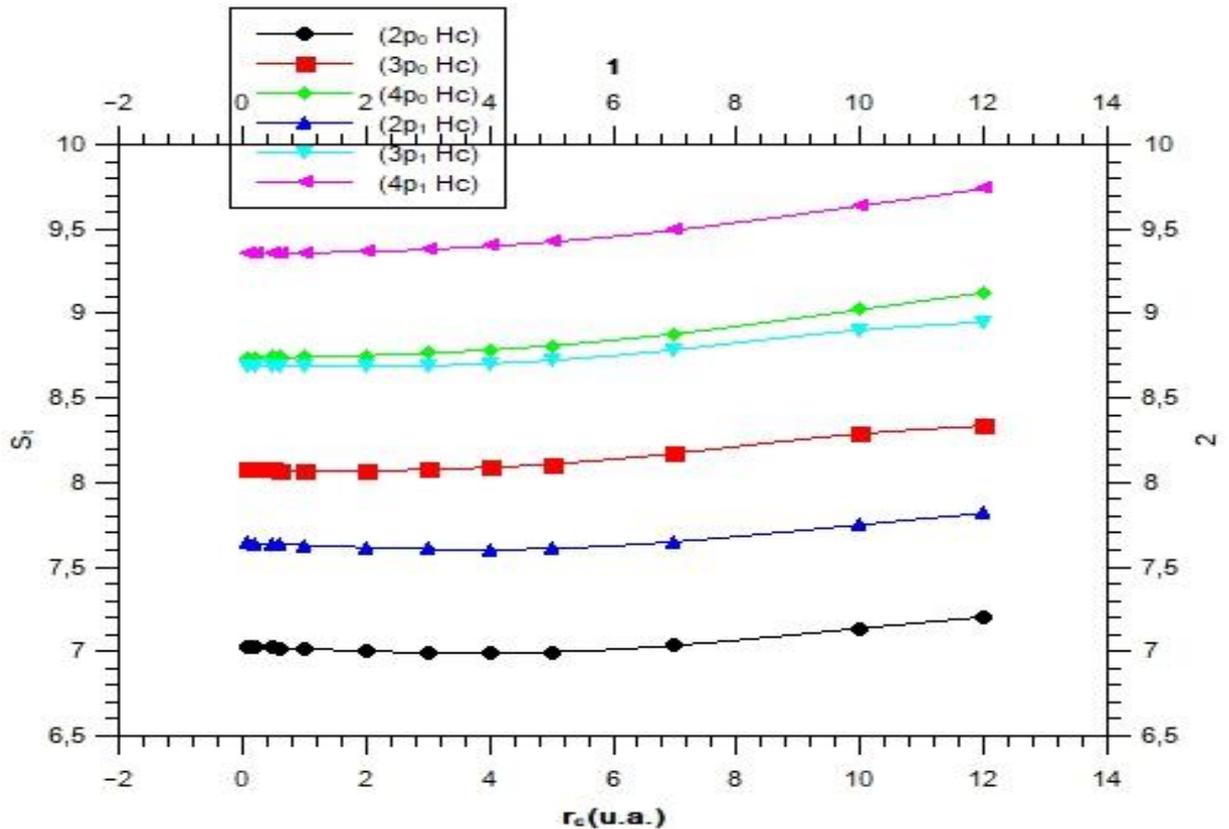


Figura 16. Soma Entrópica (S_t) versus Raio de Confinamento (r_c) para o subnível p do sistema H_c .

Observamos agora, os gráficos, separadamente para cada estado quântico principal n do Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c), e S_t versus r_c . Acrescentamos nesta análise os resultados de S_t para uma Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica e_c^- , cujos valores estão disponíveis no Apêndice C.

Na Figura 17 temos os valores para o Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) e para a Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (e_c^-) para, $n=1$, $l=1$ e $|m|=0$ e 1 com os valores de S_t (e_c^-), obtidos na presente Dissertação são 7,0300, para $m=0$, e S_t (e_c^-) é 7,6437, para $|m|=1$. Neste caso, os resultados indicam que, quanto mais diminuirmos o raio de confinamento para o Átomo de Hidrogênio (H_c) a Soma Entrópica (S_t) do Átomo de Hidrogênio tende para a Soma Entrópica (S_t) da Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (e_c^-). Ou seja, o potencial coulombiano ao ser submetido a um confinamento rigoroso, deixa de ser dominante e o Átomo de Hidrogênio passa a se comportar como um Elétron Confinado em uma Gaiola Esférica (e_c^-), algo semelhante como constatado em: 1s na Figura 5; 2s da Figura 10; 3s da Figura 11 e 4s da Figura 12.

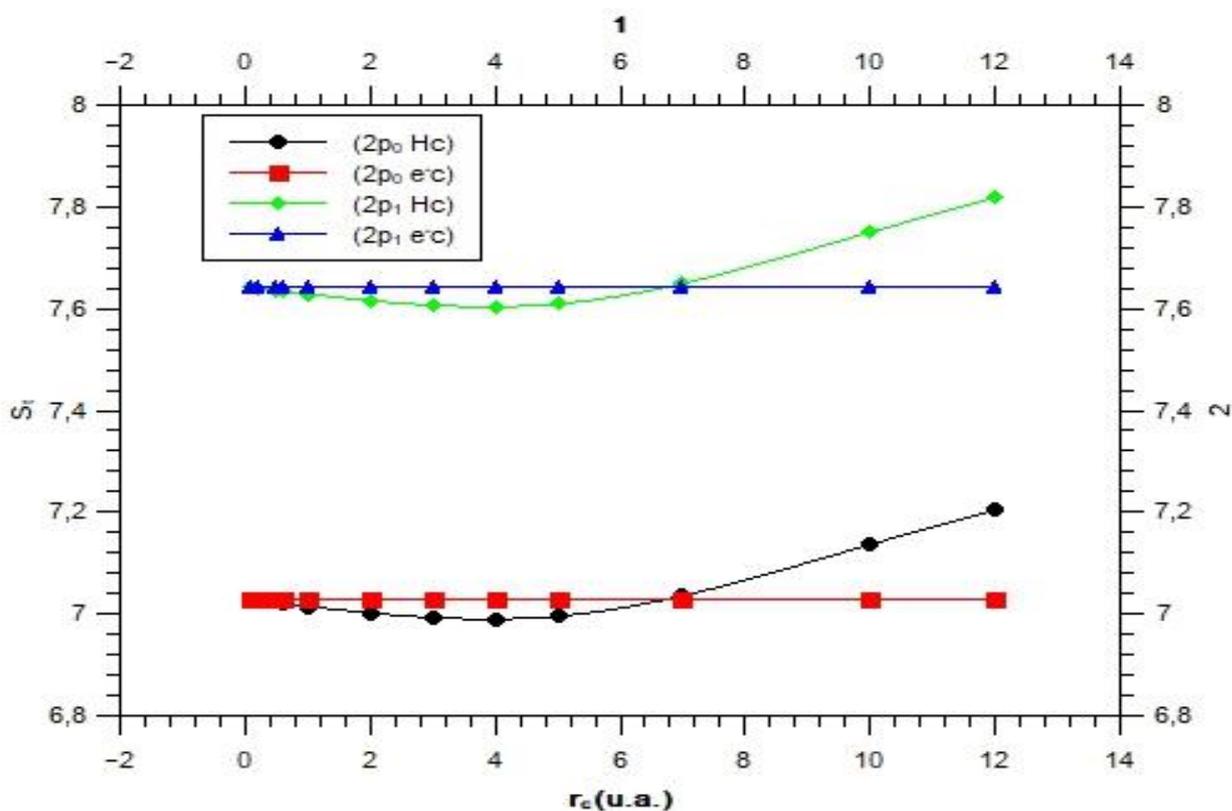


Figura 17. Soma Entrópica versus Raio de Confinamento (r_c) para $2p_0$ e $2p_1$ para os sistemas H_c e e_c^- .

Para o estudo dos estados quânticos: $3p_0$ e $3p_1$ dos sistemas H_c e e_c^- , com $n=2$, $l=1$ e $|m|=0$ e 1 , apresentamos os valores da Soma Entrópica, em função do raio de confinamento, na Figura 18. Especificamente, $S_t(e_c^-)$ é igual a 8,0757 para $3p_0$ e $S_t(e_c^-)$ é 8,6894 para $3p_1$. Na Figura 18 visualizamos que, quanto mais diminuirmos o raio de confinamento, a Soma Entrópica (S_t) do Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) converge para a Soma Entrópica (S_t) da Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (e_c^-). Como discutido anteriormente, o potencial coulombiano, ao sofrer um confinamento rigoroso, deixa de ser importante e o Átomo de Hidrogênio Confinado passa a ser um Elétron Confinado em uma Gaiola Esférica (e_c^-), algo semelhante como vimos para: 1s na Figura 5; 2s da Figura 10; 3s da Figura 11; 4s da Figura 12 e $2p_0$ e $2p_1$ na Figura 17.

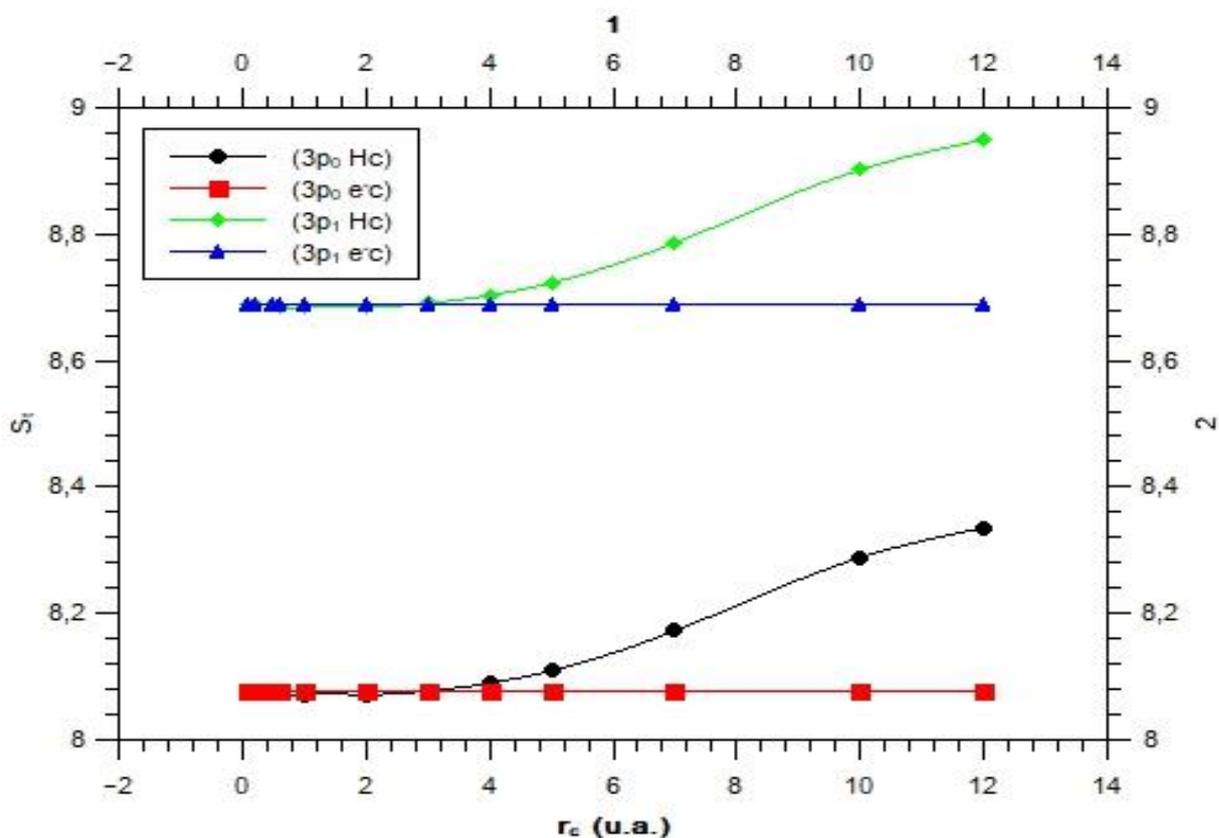


Figura 18. Soma Entrópica versus Raio de Confinamento (r_c) para os estados $3p_0$ e $3p_1$ dos sistemas H_c e e_c^- .

Para o estudo dos estados quânticos: $4p_0$ e $4p_1$ dos sistemas H_c e e_c^- , com $n=3$, $l=1$ e $|m|=0$ e 1 , apresentamos os valores da Soma Entrópica, em função do raio de confinamento, na Figura 19. Especificamente, $S_t(e_c^-)$ é igual a 8,7387 para $4p_0$ e $S_t(e_c^-)$ é 9,3524 para $4p_1$. Na Figura 19 visualizamos que, quanto mais diminuirmos o raio de confinamento, a Soma Entrópica (S_t) do Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) converge para a Soma Entrópica (S_t) da Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (e_c^-). Como discutido anteriormente, o potencial coulombiano, ao sofrer um confinamento rigoroso, deixa de ser importante e o Átomo de Hidrogênio passa a ser um Elétron Confinado em uma Gaiola Esférica (e_c^-), algo semelhante como vimos para: 1s na Figura 5; 2s da Figura 10; 3s da Figura 11; 4s da Figura 12; $2p_0$ e $2p_1$ na figura 17 e $3p_0$ e $3p_1$ da Figura 18.

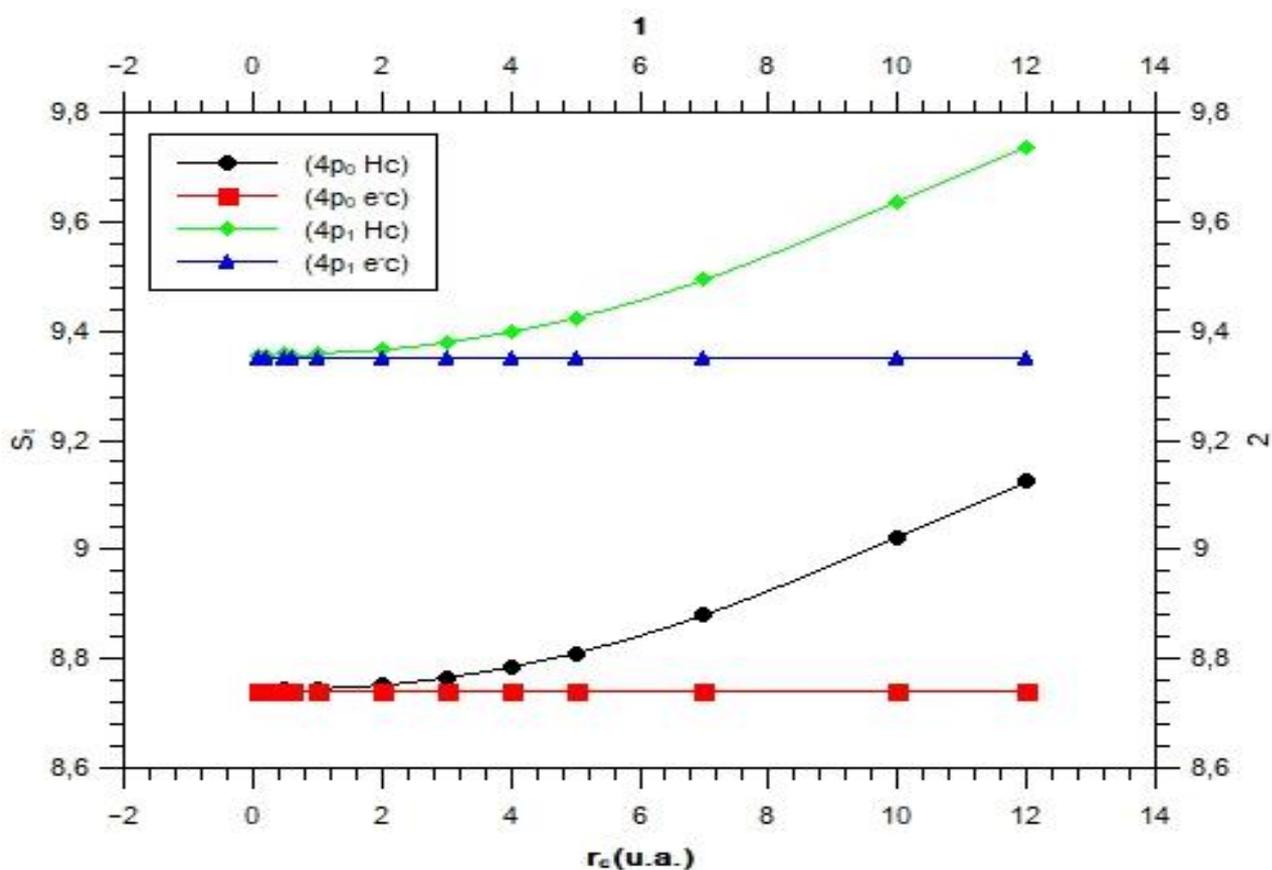


Figura 19. Soma Entrópica versus Raio de Confinamento (r_c) para os estados $4p_0$ e $4p_1$ dos sistemas H_c e e_c^- .

3.3.4. Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) para o Momento Angular de $l=2$.

Por fim, apresentamos agora uma discussão sobre os dois primeiros estados com momento angular $l=2$. Salientamos que, neste caso, o módulo do número quântico azimutal $|m|$ pode assumir os valores de 0, 1 e 2. Os cálculos foram realizados usando os mesmos parâmetros de cálculos que os empregados nos casos de $l=0$ e $l=1$. Na Tabela 7 são mostrados os valores da Energia (E), de S_r , S_p e S_t para diferentes valores de r_c de subnível d ($l=2$) para os dois primeiros números quânticos: 3d e 4d do Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c).

Tabela 7. E, S_r , S_p e S_t para o subnível d do Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) para diferentes raios de confinamento. Na primeira entrada para cada r_c são apresentados os resultados para $m=0$, na segunda entrada $|m| = 1$, e na terceira entrada temos para $|m| = 2$. Todos os valores estão em unidade atômica (u.a.).

3d				
r_c	E	S_r	S_p	S_t
0,10	1644,5299	-6,3560	14,0038	7,6478
0,10	1644,5299	-6,1339	14,2258	8,0918
0,10	1644,5299	-6,1339	14,2258	8,0918
0,20	407,0429	-4,2772	11,9245	7,6473
0,20	407,0429	-4,0552	12,1465	8,0913
0,20	407,0429	-4,0552	12,1465	8,0913
0,50	63,1602	-1,5304	9,1763	7,6459
0,50	63,1602	-1,3084	9,3983	8,0899
0,50	63,1602	-1,3084	9,3983	8,0899
0,60	43,4051	-0,9842	8,6295	7,6453
0,60	43,4051	-0,7622	8,8516	8,0894
0,60	43,4051	-0,7622	8,8516	8,0894
1,00	14,9675	0,5453	7,0981	7,6434
1,00	14,9675	0,7673	7,3201	8,0875
1,00	14,9675	0,7673	7,3201	8,0874
2,00	3,3275	2,6167	5,0225	7,6392
2,00	3,3275	2,8387	5,2446	8,0833
2,00	3,3275	2,8387	5,2446	8,0832
3,00	1,2928	3,8239	3,8120	7,6359
3,00	1,2928	4,0459	4,0340	8,0799
3,00	1,2928	4,0459	4,0340	8,0799
4,00	0,6214	4,6766	2,9570	7,6337

4,00	0,6214	4,8987	3,1791	8,0777
4,00	0,6214	4,8986	3,1791	8,0777
5,00	0,3291	5,3344	2,2984	7,6328
5,00	0,3291	5,5564	2,5205	8,0768
5,00	0,3291	5,5564	2,5205	8,0768
7,00	0,0966	6,3155	1,3209	7,6365
7,00	0,0966	6,5376	1,5430	8,0805
7,00	0,0966	6,5376	1,5429	8,0805
10,00	-0,0071	7,3275	0,3352	7,6628
10,00	-0,0071	7,5496	0,5573	8,1068
10,00	-0,0071	7,5495	0,5573	8,1068
12,00	-0,0312	7,8219	-0,1244	7,6975
12,00	-0,0312	8,0439	0,0976	8,1416
12,00	-0,0312	8,0439	0,0976	8,1416
4d				
r_c	E	S_r	S_p	S_t
0,10	4115,5826	-6,5944	15,0677	8,4733
0,10	4115,5826	-6,3724	15,2897	8,9173
0,10	4115,5826	-6,3724	15,2897	8,9173
0,20	1023,7974	-4,5155	12,9884	8,4729
0,20	1023,7974	-4,2934	13,2104	8,9170
0,20	1023,7974	-4,2934	13,2104	8,9170
0,50	161,3570	-1,7680	10,2388	8,4708
0,50	161,3570	-1,5460	10,4608	8,9148
0,50	161,3570	-1,5460	10,4608	8,9148
0,60	111,4854	-1,2215	9,6933	8,4718
0,60	111,4854	-0,9995	9,9153	8,9159
0,60	111,4854	-0,9995	9,9153	8,9159
1,00	39,3153	0,3091	8,1617	8,4709
1,00	39,3153	0,5312	8,3838	8,9149
1,00	39,3153	0,5311	8,3837	8,9149
2,00	9,3142	2,3839	6,0857	8,4696
2,00	9,3142	2,6060	6,3077	8,9136
2,00	9,3142	2,6060	6,3077	8,9136
3,00	3,9092	3,5958	4,8741	8,4699
3,00	3,9092	3,8178	5,0962	8,9139
3,00	3,9092	3,8178	5,0962	8,9139
4,00	2,0684	4,4543	4,0177	8,4721
4,00	2,0684	4,6764	4,2398	8,9161
4,00	2,0684	4,6763	4,2398	8,9161
5,00	1,2397	5,1194	3,3569	8,4763
5,00	1,2397	5,3415	3,5789	8,9204
5,00	1,2397	5,3415	3,5789	8,9204
7,00	0,5457	6,1209	2,3711	8,4920
7,00	0,5457	6,3429	2,5932	8,9361
7,00	0,5457	6,3429	2,5932	8,9361
10,00	0,2024	7,1818	1,3558	8,5376
10,00	0,2024	7,4038	1,5779	8,9816

10,00	0,2024	7,4038	1,5778	8,9816
12,00	0,1100	7,7254	0,8596	8,5850
12,00	0,1100	7,9474	1,0816	9,0290
12,00	0,1100	7,9474	1,0816	9,0290

Da análise da Tabela 7, constatamos que, as variações de S_r e S_p respeitam o Princípio de Incerteza Entrópico, pois os valores de S_t encontrados estão acima do valor mínimo permitido que é de 6,4341. Adicionalmente observamos que, como de se esperar, os valores de Energia não dependem de m . Por outro lado, os valores de S_r , S_p e S_t variam com o número quântico azimutal m . Esta dependência é devido ao termo $S(Ylm)$, já que a função de onda radial (e portanto $S(Rnl)$ e $S(Fnl)$) não dependem de m .

Na Figura 20, apresentamos os valores esperados de energia (E) para os estados 3d e 4d do H_c em função de r_c . Notamos que, quando r_c diminui, os valores das energias crescem e, para $r_c \rightarrow \infty$, os valores convergem para o Átomo de Hidrogênio Livre. Além disso, dado um r_c , os valores de energia aumentam quando o número quântico ($n=3$ e $n=4$) do sistema aumenta.

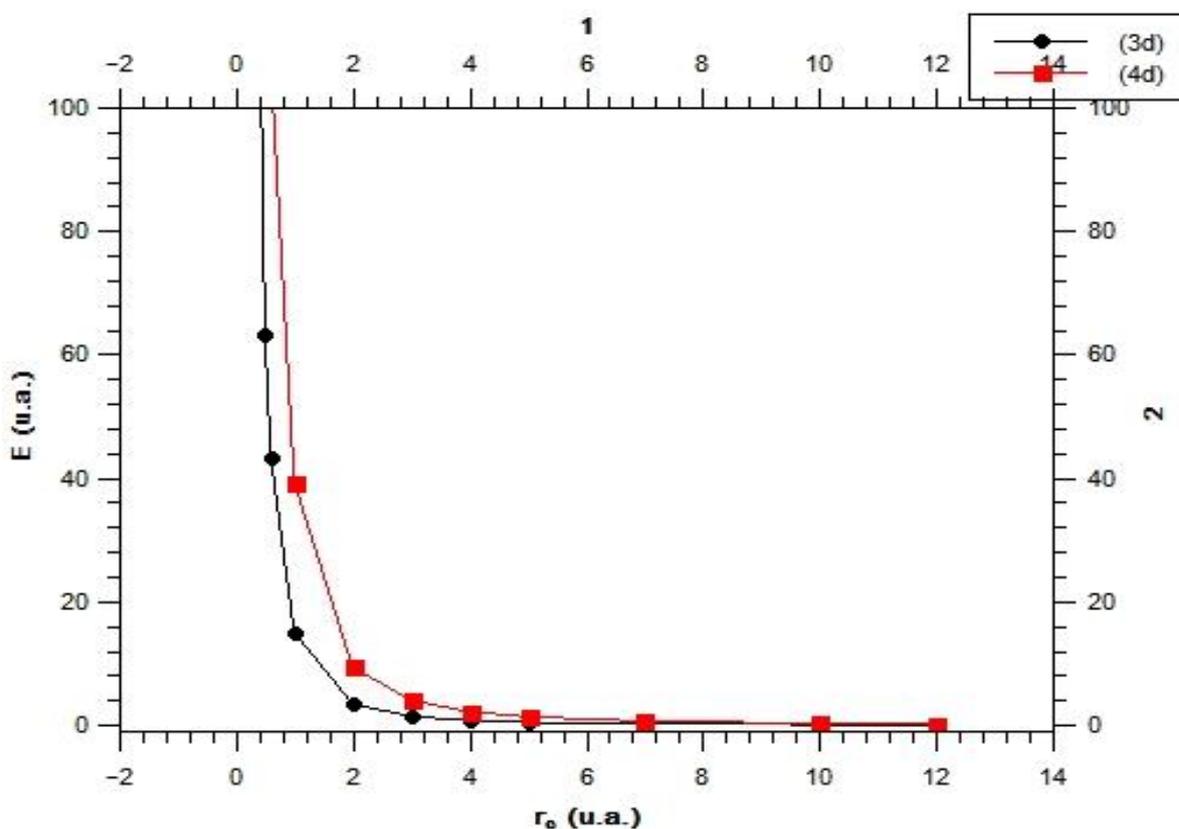


Figura 20. Energia versus Raio de Confinamento (r_c) para o subnível d da tabela 7.

Passaremos agora para o entendimento do comportamento da S_r e S_p em função de r_c , com a representação de seus valores na Figura 21 para os estados quânticos utilizados: 3d e 4d ao quais chamaremos de: $3d_0$ e $4d_0$ para o Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) com $m=0$. Observamos nela que S_r diminui com a restrição de r_c , ou seja, quando a distância de confinamento é reduzida a Incerteza na localização da partícula diminui. Em contrapartida, os valores de S_p aumentam com a diminuição de r_c .

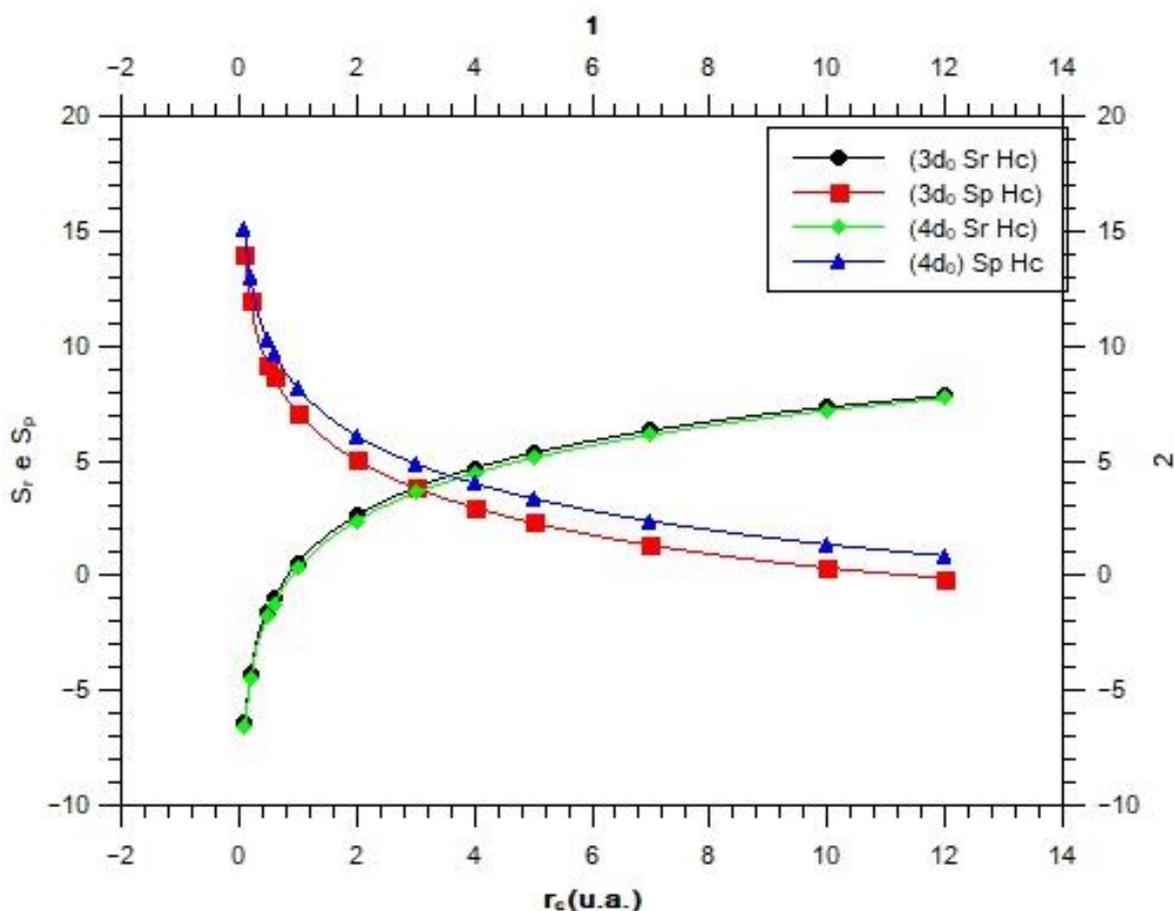


Figura 21. S_r e S_p versus Raio de Confinamento (r_c) para o subnível d ($m=0$).

Acompanhando as inflexões das curvas da Figura 21 para $m=0$, enquanto: $3d_0 S_r H_c$ e $4d_0 S_r H_c$ estão mais próximos quando r_c tende a zero, os valores de: $3d_0 S_p H_c$ e $4d_0 S_p H_c$ encontram-se mais separados tomando como referência à situação de r_c tendendo a zero.

Os pontos de interseções de cada estado das curvas da Figura 21 para S_r e S_p em função de r_c (x, y) são:

$$3d_0 S_r H_c \text{ com } 3d_0 S_p H_c: (r_c, S_r = S_p) \approx (3,0293; 3,8648);$$

$$4d_0 S_r H_c \text{ com } 4d_0 S_p H_c: (r_c, S_r = S_p) \approx (3,6808; 4,2241).$$

Esses cruzamentos significam que fisicamente as Incertezas das Posições e dos Momentos para estes pontos são as mesmas.

Passaremos agora para o entendimento do comportamento da S_r e S_p em função de r_c , com a representação de seus valores na Figura 22, para os estados quânticos: 3d e 4d ao quais chamaremos de: $3d_1$ e $4d_1$ para o Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) com $|m|=1$. Observamos nela que S_r diminui com a restrição de r_c , ou seja, quando a distância de confinamento é reduzida a Incerteza na localização da partícula diminui. Em contrapartida, os valores de S_p aumentam com a diminuição de r_c .

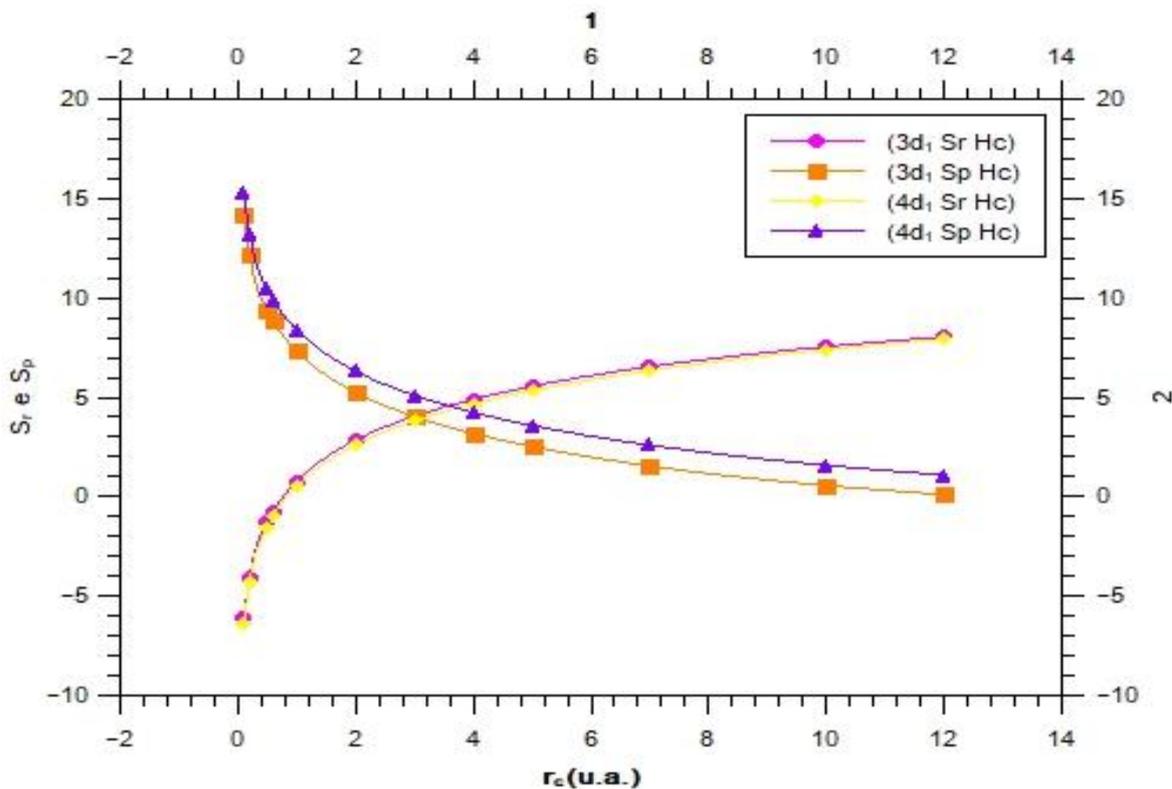


Figura 22. S_r e S_p versus Raio de Confinamento (r_c) para o subnível d ($|m|=1$), denotado nesta Dissertação por d_1 .

Acompanhando as inflexões das curvas da Figura 22 para $|m|=1$, enquanto: $3d_1 S_r H_c$ e $4d_1 S_r H_c$ estão mais próximos quando r_c tende a zero, os valores de: $3d_1 S_p H_c$ e $4d_1 S_p H_c$ encontram-se mais separados tomando como referência à situação de r_c tendendo a zero.

Os pontos de interseções de cada estado das curvas da Figura 22 para S_r e S_p em função de r_c (x, y) são:

$$3d_1 S_r H_c \text{ com } 3d_1 S_p H_c: (r_c, S_r = S_p) \approx (3,0163; 4,0080);$$

$$4d_1 S_r H_c \text{ com } 4d_1 S_p H_c: (r_c, S_r = S_p) \approx (3,7590; 4,4828).$$

Esses cruzamentos significam que fisicamente as Incertezas das Posições e dos Momentos para estes pontos são as mesmas.

Passaremos agora para o entendimento do comportamento da S_r e S_p em função de r_c , com a representação de seus valores na Figura 23, para os estados quânticos: $3d$ e $4d$ ao quais chamaremos de: $3d_2$ e $4d_2$ para o Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) com $|m|=2$. Observamos nela que S_r diminui com a restrição de r_c , ou seja, quando a distância de confinamento é reduzida a Incerteza na localização da partícula diminui. Em contrapartida, os valores de S_p aumentam com a diminuição de r_c .

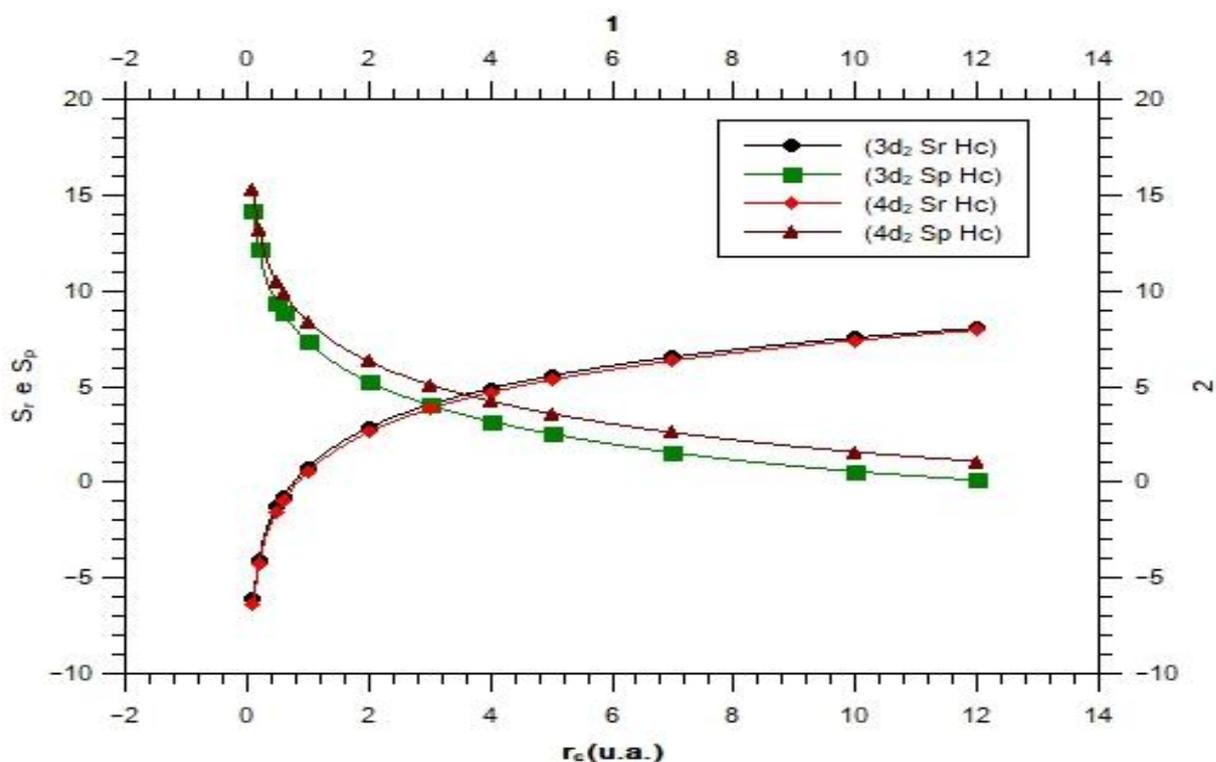


Figura 23. S_r e S_p versus Raio de Confinamento (r_c) para o subnível d ($|m|=2$), denotado nesta Dissertação por d_2 .

Acompanhando as inflexões das curvas da Figura 23 para $|m|=2$, enquanto: $3d_2 S_r H_c$ e $4d_2 S_r H_c$ estão mais próximos quando r_c tende a zero, os valores de: $3d_2 S_p H_c$ e $4d_2 S_p H_c$ encontram-se mais afastados tomando como referência à situação de r_c tendendo a zero.

Os pontos de interseções de cada estado das curvas da Figura 23 para S_r e S_p em função de r_c (x, y) são:

$$3d_2 S_r H_c \text{ com } 3d_2 S_p H_c: (r_c, S_r = S_p) \approx (3,0163; 4,0080);$$

$$4d_2 S_r H_c \text{ com } 4d_2 S_p H_c: (r_c, S_r = S_p) \approx (3,7590; 4,4828).$$

Esses cruzamentos significam que fisicamente as Incertezas das Posições e dos Momentos para estes pontos são as mesmas. Uma observação importante notada, quando o momento angular é $l=2$ os valores das entradas $|m|=1$ e $|m|=2$ são os mesmos para os raios analisados por essa Dissertação.

Passaremos agora para a Soma Entrópica (S_t) em função do raio de confinamento r_c , representando na Figura 24, os resultados para os estados quânticos $3d$ e $4d$, tanto com $m=0$, $|m|=1$ e $|m|=2$, denotados por $3d_0$, $3d_1$, $3d_2$, $4d_0$, $4d_1$ e $4d_2$. Constata-se, desta forma, que as variações de S_r e S_p respeitam o Princípio de Incerteza Entrópico, pois os valores de S_t encontrados na Tabela 7 estão acima dos valores mínimos permitidos que de 6,4341. Nota-se que com o aumento do estado quântico o valor da Soma Entrópica (S_t) aumenta, isso é perceptível nas curvas em: $3d_0 H_c$ e $4d_0 H_c$. Já as curvas: $3d_1 H_c$ e $3d_2 H_c$, $4d_1 H_c$ e $4d_2 H_c$ ficam sobrepostas, respectivamente.

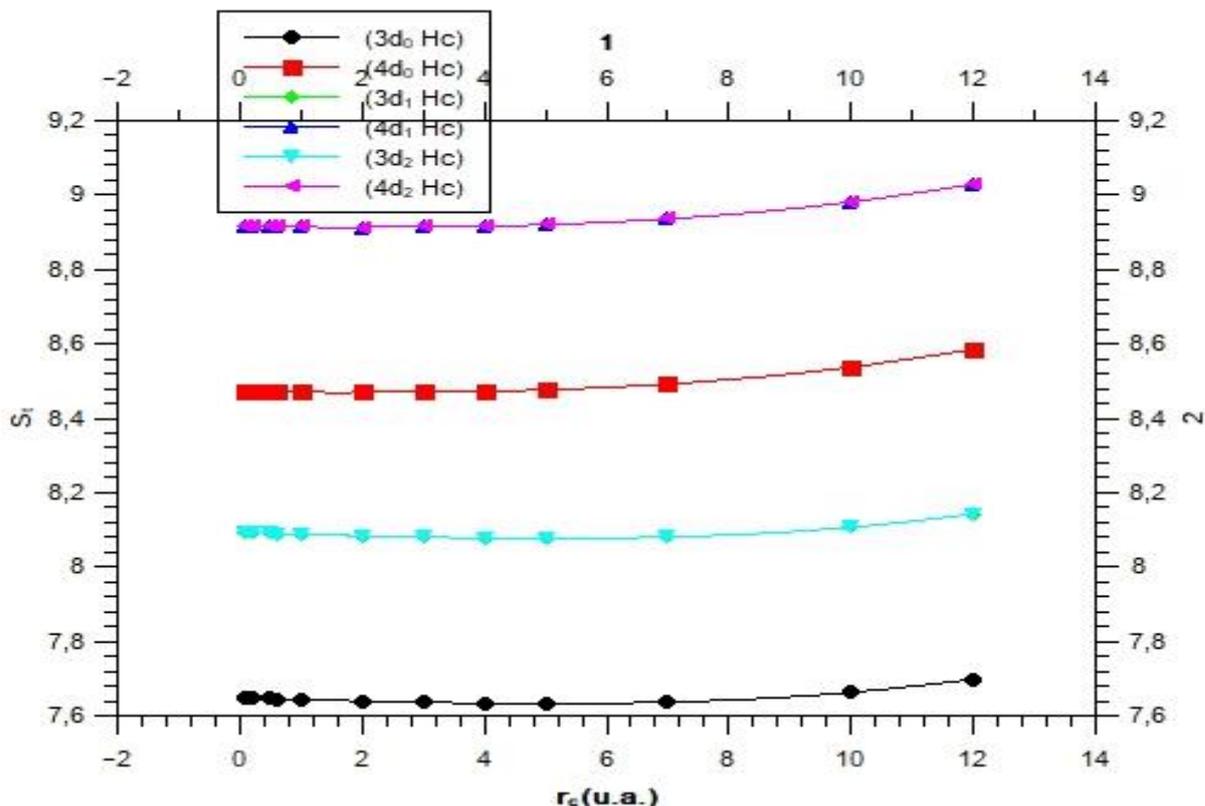


Figura 24. Soma Entrópica (S_t) versus Raio de Confinamento (r_c) para o subnível d do sistema H_c .

Observamos agora, os gráficos, separadamente para cada estado quântico principal n do Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c), e S_t versus r_c . Acrescentamos nesta análise os resultados de S_t para uma Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (e_c^-), cujos valores estão disponíveis no Apêndice C.

Na Figura 25 temos os valores para o Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) e para a Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (e_c^-) para, $n=1$, $l=2$ e $|m|=0, 1$ e 2 com os valores de S_t (e_c^-), obtidos na presente Dissertação são: 7,6480, para $m=0$; 8,0920, para $|m|=1$ e $|m|=2$. Neste caso, os resultados indicam que, quanto mais diminuirmos o raio de confinamento para o Átomo de Hidrogênio (H_c) a Soma Entrópica (S_t) do Átomo de Hidrogênio tende para a Soma Entrópica (S_t) da Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (e_c^-). Ou seja, o potencial coulombiano ao ser submetido a um confinamento rigoroso, deixa de ser dominante e o Átomo de Hidrogênio passa a se comportar como um Elétron Confinado em uma Gaiola Esférica (e_c^-), algo semelhante como constatado em: 1s na Figura 2; 2s da Figura 7; 3s da Figura 8; 4s da Figura 9; $2p_0$ e $2p_1$ na figura 13; $3p_0$ e $3p_1$ da Figura 14 e $4p_0$ e $4p_1$ da Figura 15.

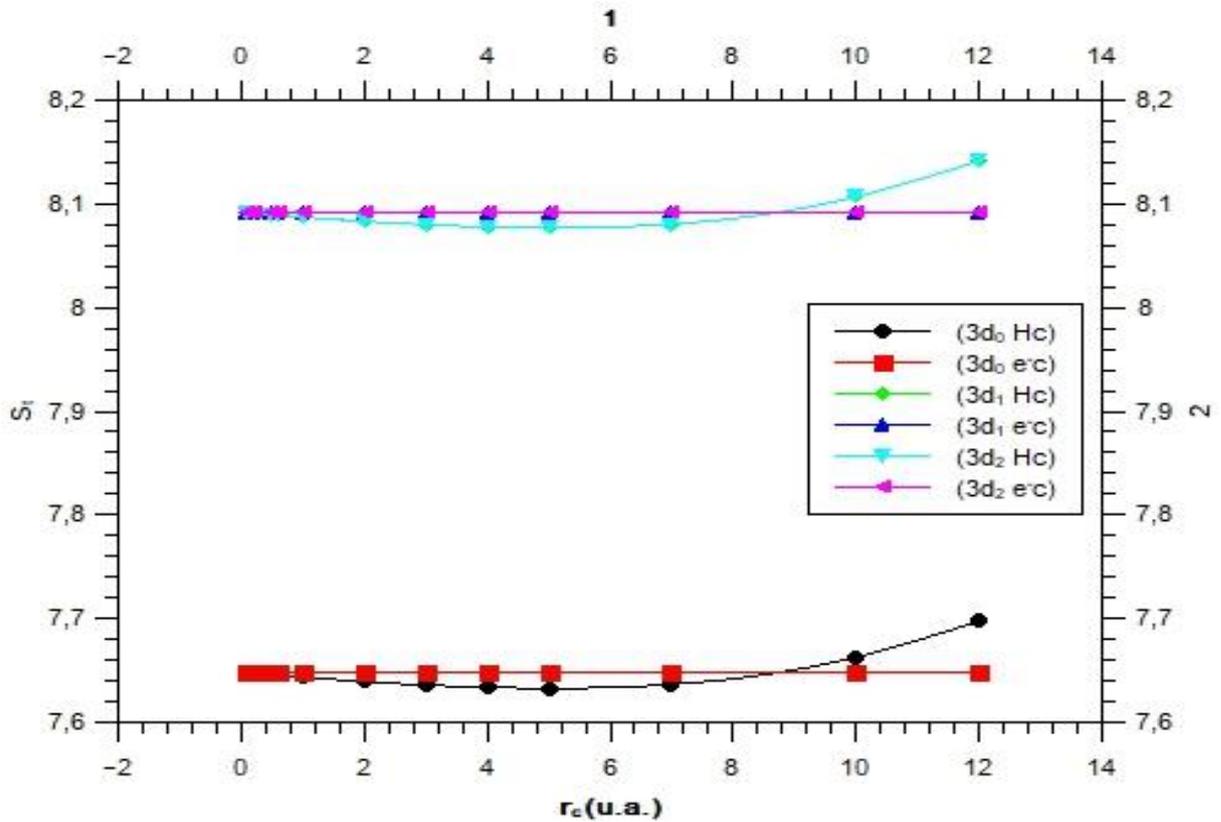


Figura 25. Gráfico da Soma Entrópica (S_t) versus Raio de Confinamento (r_c) com $3d_0$, $3d_1$ e $3d_2$ para os sistemas H_c e e_c^- .

Para o estudo dos estados quânticos: $4d_0$, $4d_1$ e $4d_2$ dos sistemas H_c e e_c^- , com $n=2$, $l=2$ e $|m|=0, 1$ e 2 , apresentamos os valores da Soma Entrópica (S_t), em função do Raio de Confinamento (r_c), na Figura 26, temos os valores para o Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) e para a Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (e_c^-) para, $n=1$, $l=2$ e $|m|=0, 1$ e 2 com os valores de $S_t(e_c^-)$, obtidos na presente Dissertação são: 8,4728, para $m=0$; 8,9169, para $|m|=1$ e 8,9168, para $|m|=2$.

Na Figura 26, visualizamos que, quanto mais diminuirmos o raio de confinamento, a Soma Entrópica (S_t) do Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) converge para a Soma Entrópica (S_t) da Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (e_c^-). Como discutido anteriormente, o potencial coulombiano, ao sofrer um confinamento rigoroso, deixa de ser importante e o Átomo de Hidrogênio passa a ser um Elétron Confinado em uma Gaiola Esférica (e_c^-), algo semelhante como vimos para: $1s$ na Figura 5; $2s$ da Figura 10; $3s$ da Figura 11; $4s$ da Figura 12 e $2p_0$ e $2p_1$ na Figura 17; $3p_0$ e $3p_1$ da Figura 18; $4p_0$ e $4p_1$ da Figura 19 e $3d_0$, $3d_1$ e $3d_2$ da Figura 25.

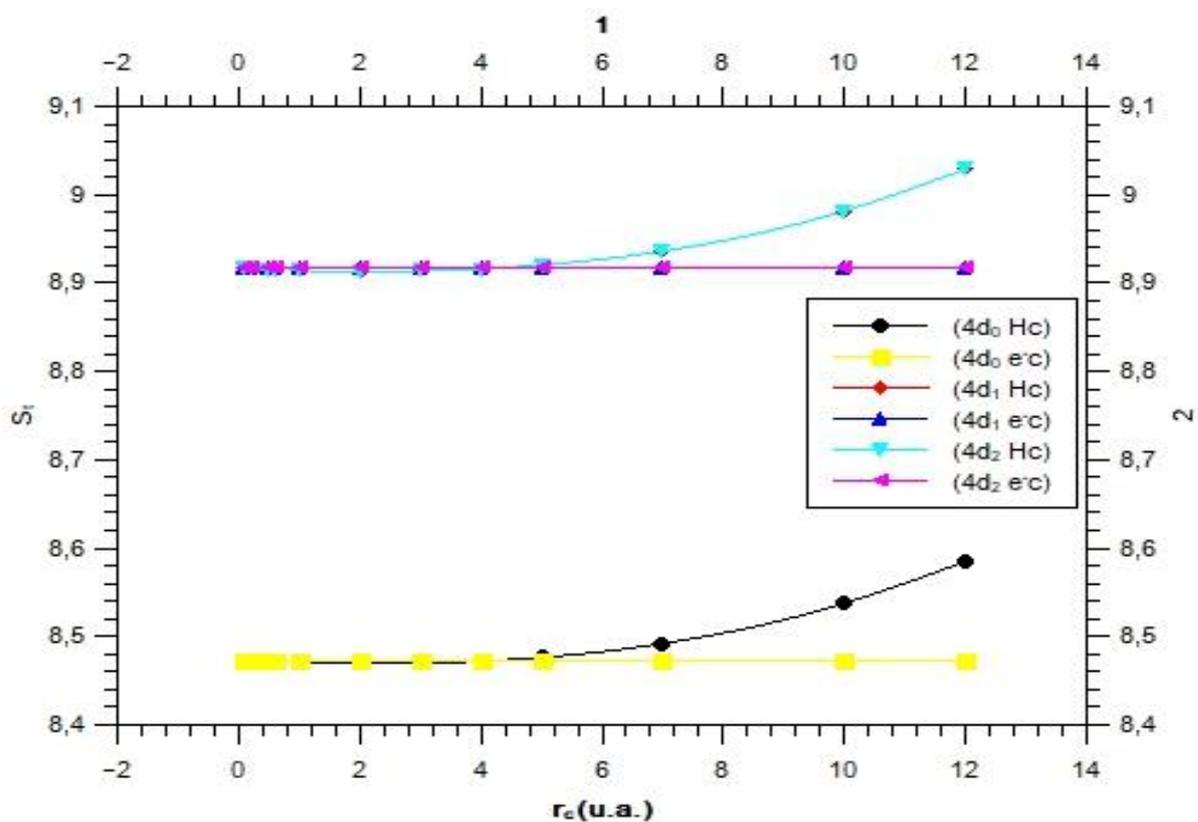


Figura 26. Gráfico da Soma Entrópica (S_t) versus Raio de Confinamento (r_c) com $4d_0$, $4d_1$ e $4d_2$ para os sistemas H_c e e_c^- .

Capítulo 4-Conclusões e Perspectivas.

Esta Dissertação teve o intuito de estudar o Átomo de Hidrogênio Confinado, por meio da Entropia de Shannon, empregado a versão-p do Método do Elemento Finito. Para consolidação de tal proposta, implementamos um programa computacional na linguagem Fortran 77, para determinar algumas propriedades do Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c). Utilizamos a expansão da parte radial na função de onda em um conjunto finitos de funções de base $\{f_i\}$, para achar as autofunções e os autovalores de $J[\Psi, \Psi_S]$. Após algumas considerações, utilizamos um potencial efetivo, supondo que $\chi_l(r)$ fosse zerar na superfície de uma dada esfera com raio $r = r_c$, para chegarmos na matriz Hamiltoniana $\{\mathbf{H}^l\}_{ij}$ e na matriz Overlap $\{\mathbf{O}\}_{ij}$, impondo a condição $\chi_l(0) = 0$ e $\chi_l(r_c) = 0$, utilizando o Princípio Variacional por meio da versão-p do Método do Elemento Finito (p-MEP). Para a escolha da malha foi utilizado o Procedimento Mecânico Quântico, ao qual foram usadas as funções ortonormais para construção de quadratura. Com a Entropia de Shannon, também conhecida como Teoria da Informação é possível fazer a união com a Teoria Quântica desencadeando em expressões para a Entropia de Shannon no Espaço das Posições (S_r) e dos Momentos (S_p), as quais dividimos em $S(\text{Rnl})$, $S(\text{Fnl})$ e $S(\text{Ylm})$. Da apropriação dessas equações chegamos à Soma Entrópica (S_t), e à relação de Incerteza Entrópica, ao qual (S_t), para o sistema de uma partícula, tem um valor mínimo de 6,4341. Os momentos angulares em estudo foram $l=0$, $l=1$ e $l=2$ para alguns valores de (r_c) e alguns estados (1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s, 4p e 4d) observamos algumas características comuns para esses estados quânticos, que passamos a citar.

Ponto de interseção das curvas S_r e S_p para um mesmo estado quântico, em função de r_c , tem um significado físico importante, pois diz que as Incertezas das Posições e dos Momentos são as mesmas naquele cruzamento de curvas.

Por outro lado, analisando a Energia (E) em função do raio de confinamento (r_c), notamos que os valores de E cresce com a redução de r_c , sofrendo uma forte inflexão quando a situação de confinamento aumenta. Além disso, quando o raio de confinamento(r_c) aumenta a Energia (E) do Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) tende para a Energia (E) do Átomo de Hidrogênio Livre.

Analisando os gráficos para a Soma Entrópica (S_t) em função do raio de confinamento (r_c), com o aumento dos números quânticos principais (n), os valores de

S_t aumentam. Também constatamos que as variações de S_r e S_p respeitam o Princípio da Incerteza Entrópica (S_t).

Além disso, encontramos a resposta deixada pelo artigo do JIAO et.al., (2017), que até então era desconhecida a Soma Entrópica (S_t) do Átomo de Hidrogênio com o raio de confinamento tendendo a zero. Analisando os estados quânticos: 1s da Figura 5; 2s da Figura 10; 3s da Figura 11; 4s da Figura 12; $2p_0$ e $2p_1$ da Figura 17; $3p_0$ e $3p_1$ da Figura 18; $4p_0$ e $4p_1$ da Figura 19; $3d_0$, $3d_1$ e $3d_2$ na Figura 25; $4d_0$, $4d_1$ e $4d_2$ da Figura 26, constatamos que, quanto mais diminuirmos o raio de confinamento para o Átomo de Hidrogênio Confinado (H_c) a Entropia Total (S_t) deste tende para a Soma Entrópica da Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (e_c^-). Ou seja, o potencial coulombiano em um sistema confinado deixa de ser importante para confinamentos drásticos e o Átomo de Hidrogênio passa a se comportar como um Elétron Confinado em uma Gaiola Esférica.

Por fim, concluímos que o procedimento apresentado foi bastante eficiente e acreditamos ter demonstrado a viabilidade na aplicação da obtenção da Entropia de Shannon para o átomo de Hidrogênio confinado usando o Método do Elemento Finito.

As perspectivas de estudos nesta linha de trabalho são vastas, podemos citar: analisar a extensão da obtenção da Entropia de Shannon para o Átomo de Hidrogênio Confinado usando o Método do Elemento Finito, obtenção da Entropia de Shannon para outros Átomos Confinados, usando o Método do Elemento Finito; variação de Entropia para estados altamente excitados de Rydberg, efeito de combinação com campo externo; utilizar o Procedimento Mecânico Quântico Auto-consistente para estudar a Entropia de Shannon para o Átomo de Hidrogênio Confinado e outros.

Apêndice.

Apêndice A- Unidades em Física Atômica e Molecular.

As unidades atômicas são expressas pelo símbolo u.a, como vimos em algumas tabelas e do próprio texto dessa Dissertação, essa abreviação é da expressão “atomic unit”.

Na área da Física Atômica e Molecular as quatro unidades fundamentais são: a carga do elétron representado por e , a massa do elétron dado por m_e , a constante de Plank \hbar que pode ser escrita como $\frac{h}{2\pi}$ e a constante de força eletrostática $\frac{1}{4\pi\epsilon_0}$ NASCIMENTO (2018. p. 115). Manipulando essas quatro constantes, chega-se as unidades atômicas derivadas como: comprimento, energia etc...A tabela seguinte mostra algumas grandezas, símbolos e nomes de unidades.

Tabela A.1: Algumas grandezas do Sistema de unidades atômicas (u.a.)

Quantidade Física	Símbolo da unidade	Nome da unidade
Massa	m_e	Massa do elétron
Carga	e	Carga elementar
Ação	\hbar	Constante de Plank
Comprimento	a_0	Bohr
Energia	E_h	Hartree
Constante de força eletrostática	$\frac{1}{4\pi\epsilon_0}$	Constante de Coulomb

Sendo que o raio de Bohr é $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$ e a energia de Hartree é dada por : $E_h = \frac{\hbar^2}{m_e a_0^2}$. Utilizando 1 para as unidades atômicas: m_e, e, \hbar, a_0 .

Apêndice B- Comparações dos Valores de S (Rnl) e S(Fnl).

A seguir apresentaremos os valores da Energia (E), Entropia Radial de Shannon S (Rnl) e a Entropia do Momento Linear de Shannon S(Fnl) para o átomo de Hidrogênio em diferentes estados e variações do raio de confinamento (r_c): 0,2;0,5;0,6;1,0;2,0;3,0;4,0;5,0;7,0 e 10. Para comparar os nossos cálculos temos as referências E, S(Rnl) e S(Fnl) do artigo informações de apoio do JIAO et.al., (2017).

Tabela B.1: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 1s. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).

r_c	Ref. E	E	Ref .S (Rnl)	S (Rnl)	Ref. S (Fnl)	S (Fnl)
0,10	-	468,9930	-	-8,7755	-	10,3225
0,20	111,0699	111,0699	-6,7089	-6,7089	8,2477	8,2477
0,50	14,7480	14,7480	-4,0013	-4,0014	5,5162	5,5162
0,60	9,5277	9,5277	-3,4692	-3,4692	4,9764	4,9764
1,00	2,3740	2,3740	-2,0020	-2,0020	3,4804	3,4804
2,00	-0,1250	-0,1250	-0,1344	-0,1344	1,5683	1,5683
3,00	-0,4240	-0,4240	0,7853	0,7853	0,6491	0,6491
4,00	-	-0,4833	-	1,2632	-	0,1931
5,00	-0,4964	-0,4964	1,4864	1,4864	-0,0067	-0,0067
7,00	-0,4999	-0,4999	1,6029	1,6029	-0,1016	-0,1016
10,00	-0,5000	-0,5000	1,6136	1,6136	-0,1091	-0,1091
12,00	-	-0,5000	-	1,6137	-	-0,1092

Tabela B.2: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 2s. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).

r_c	Ref. E	E	Ref .S (Rnl)	S (Rnl)	Ref. S (Fnl)	S (Fnl)
0,10	-	1942,7204	-	-8,9785	-	12,1078
0,20	477,8517	477,8517	-6,9003	-6,9003	10,0284	10,0284
0,50	-	72,6720	-	-4,1541	-	7,2814
0,60	49,5847	49,5847	-3,6077	-3,6077	6,7335	6,7334
1,00	16,5703	16,5703	-2,0756	-2,0756	5,2037	5,2037
2,00	3,3275	3,3275	0,0193	0,0193	3,1350	3,1350
3,00	1,1117	1,1117	1,2774	1,2774	1,9233	1,9233
4,00	-	0,4202	-	2,2019	-	1,0340
5,00	0,1413	0,1413	2,9331	2,9331	0,2865	0,2865
7,00	-0,0513	-0,0513	3,9925	3,9925	-0,9651	-0,9651
10,00	-0,1128	-0,1128	4,9151	4,9151	-2,2545	-2,2545
12,00	-	-0,1214	-	5,2506	-	-2,7698

Tabela B.3: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 3s. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).

r_c	Ref. E	E	Ref .S (Rnl)	S (Rnl)	Ref. S (Fnl)	S (Fnl)
0,10	-	4406,1217	-	-9,0532	-	13,0680
0,20	1092,7127	1092,7127	-6,9734	-6,9734	10,9899	10,9899
0,50	-	170,5852	-	-4,2229	-	8,2474
0,60	117,4747	117,4747	-3,6752	-3,6752	7,7012	7,7013
1,00	40,8631	40,8631	-2,1392	-2,1392	6,1783	6,1783
2,00	9,3142	9,3142	-0,0448	-0,0448	4,1335	4,1335
3,00	3,7350	3,7350	1,1951	1,1951	2,9650	2,9650
4,00	-	1,8727	-	2,0894	-	2,1580
5,00	1,0532	1,0532	2,7956	2,7956	1,5431	1,5431
7,00	0,3922	0,3922	3,8839	3,8839	0,5898	0,5898
10,00	0,0914	0,0914	5,0567	5,0567	-0,5808	-0,5808
12,00	-	0,0198	-	5,6564	-	-1,2965

Tabela B.4: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 4s. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).

r_c	Ref. E	E	Ref .S (Rnl)	S (Rnl)	Ref. S (Fnl)	S (Fnl)
0,10	-	7857,6292	-	-9,0921	-	13,7196
0,20	1954,8815	1954,8815	-7,0119	-7,0119	11,6412	11,6412
0,50	-	308,1973	-	-4,2607	-	8,8968
0,60	212,9623	212,9623	-3,7128	-3,7128	8,3508	8,3508
1,00	75,1305	75,1305	-2,1764	-2,1764	6,8260	6,8260
2,00	17,8161	17,8161	-0,0844	-0,0844	4,7756	4,7756
3,00	7,4856	7,4856	1,1485	1,1485	3,6017	3,6017
4,00	-	3,9665	-	2,0317	-	2,7925
5,00	2,3823	2,3823	2,7243	2,7243	2,1850	2,1850
7,00	1,0574	1,0574	3,7852	3,7852	1,2977	1,2977
10,00	0,4052	0,4052	4,9332	4,9332	0,3262	0,3262
12,00	-	0,2311	-	5,5268	-	-0,2288

Tabela B.5: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 5s. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).

r_c	Ref. E	E	Ref. S (Rnl)	S (Rnl)	Ref. S (Fnl)	S (Fnl)
0,10	-	12296,7317	-	-9,1159	-	14,2128
0,20	3064,1053	3064,1053	-7,0357	-7,0357	12,1342	12,1342
0,50	-	485,4111	-	-4,2844	-	9,3885
0,60	335,9675	335,9675	-3,7366	-3,7366	8,8432	8,8431
1,00	119,3271	119,3271	-2,2005	-2,2005	7,3175	7,3175
2,00	28,8135	28,8135	-0,1104	-0,1104	5,2634	5,2634
3,00	12,3510	12,3510	1,1187	1,1187	4,0840	4,0840
4,00	-	6,6907	-	1,9965	-	3,2684
5,00	4,1176	4,1176	2,6824	2,6824	2,6551	2,6551
7,00	1,9335	1,9335	3,7284	3,7284	1,7711	1,7711
10,00	0,8264	0,8264	4,8565	4,8565	0,8570	0,8570
12,00	-	0,5192	-	5,4406	-	0,3638

Tabela B.6: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 2p. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).

r_c	Ref. E	E	Ref. S (Rnl)	S (Rnl)	Ref. S (Fnl)	S (Fnl)
0,10	-	991,0076	-	-8,4888	-	11,3192
0,20	243,1093	243,1093	-6,4118	-6,4118	9,2406	9,2406
0,50	-	36,6589	-	-3,6703	-	6,4951
0,60	24,9369	24,9369	-3,1259	-3,1259	5,9485	5,9485
1,00	8,2231	8,2231	-1,6042	-1,6042	4,4208	4,4207
2,00	1,5760	1,5760	0,4448	0,4448	2,3589	2,3589
3,00	0,4813	0,4813	1,6247	1,6247	1,1700	1,1700
4,00	-	0,1435	-	2,4439	-	0,3478
5,00	0,0076	0,0076	3,0606	3,0606	-0,2631	-0,2631
7,00	-0,0875	-0,0875	3,9309	3,9309	-1,0934	-1,0934
10,00	-0,1189	-0,1189	4,6847	4,6847	-1,7466	-1,7466
12,00	-	-0,1233	-	4,9447	-	-1,9385

Tabela B.7: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 3p. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).

r_c	Ref. E	E	Ref .S (Rnl)	S (Rnl)	Ref. S (Fnl)	S (Fnl)
0,10	-	2960,4623	-	-8,7520	-	12,6294
0,20	734,2292	734,2292	-6,6734	-6,6734	10,5502	10,5502
0,50	-	114,6436	-	-3,9272	-	7,8050
0,60	78,9560	78,9560	-3,3812	-3,3812	7,2558	7,2555
1,00	27,4740	27,4740	-1,8521	-1,8521	5,7253	5,7253
2,00	6,2690	6,2690	0,2194	0,2194	3,6538	3,6538
3,00	2,5162	2,5162	1,4291	1,4291	2,4498	2,4498
4,00	-	1,2615	-	2,2872	-	1,6041
5,00	0,7077	0,7077	2,9539	2,9539	0,9572	0,9572
7,00	0,2578	0,2578	3,9664	3,9664	0,0079	0,0079
10,00	0,0492	0,0492	5,0642	5,0642	-0,9741	-0,9742
12,00	-	-0,0016	-	5,6379	-	-1,5009

Tabela B.8: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 4p. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).

r_c	Ref. E	E	Ref .S (Rnl)	S (Rnl)	Ref. S (Fnl)	S (Fnl)
0,10	-	5918,1829	-	-8,8737	-	13,4156
0,20	1472,8370	1472,8370	-6,7946	-6,7946	11,3367	11,3366
0,50	-	232,4280	-	-4,0466	-	8,5925
0,60	160,6602	160,6602	-3,5000	-3,5000	8,0433	8,0435
1,00	56,7580	56,7580	-1,9686	-1,9686	6,5138	6,5138
2,00	13,5106	13,5106	0,1087	0,1087	4,4449	4,4449
3,00	5,7004	5,7004	1,3239	1,3239	3,2434	3,2434
4,00	-	3,0339	-	2,1868	-	2,3999
5,00	1,8304	1,8304	2,8572	2,8572	1,7549	1,7549
7,00	0,8192	0,8192	3,8724	3,8724	0,8094	0,8094
10,00	0,3161	0,3161	4,9618	4,9618	-0,1367	-0,1367
12,00	-	0,1797	-	5,5285	-	-0,6029

Tabela B.9: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 5p. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).

r_c	Ref. E	E	Ref .S (Rnl)	S (Rnl)	Ref. S (Fnl)	S (Fnl)
0,10	-	9863,6048	-	-8,9445	-	13,9797
0,20	2458,5750	2458,5750	-6,8651	-6,8651	11,9007	11,9007
0,50	-	389,8509	-	-4,1164	-	9,1559
0,60	269,9137	269,9137	-3,5695	-3,5695	8,6071	8,6070
1,00	95,9919	95,9919	-2,0371	-2,0371	7,0774	7,0774
2,00	23,2591	23,2591	0,0424	0,0424	5,0078	5,0078
3,00	10,0070	10,0070	1,2595	1,2595	3,8052	3,8052
4,00	-	5,4420	-	2,1238	-	2,9601
5,00	3,3627	3,3627	2,7952	2,7952	2,3131	2,3131
7,00	1,5920	1,5920	3,8107	3,8107	1,3617	1,3617
10,00	0,6884	0,6884	4,8953	4,8953	0,4091	0,4091
12,00	-	0,4353	-	5,4557	-	-0,0505

Tabela B.10: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 6p. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).

r_c	Ref. E	E	Ref .S (Rnl)	S (Rnl)	Ref. S (Fnl)	S (Fnl)
0,10	-	14796,4514	-	-8,9908	-	14,4199
0,20	3691,2917	3691,2917	-6,9113	-6,9113	12,3409	12,3409
0,50	-	586,8489	-	-4,1623	-	9,5950
0,60	406,6632	406,6632	-3,6152	-3,6152	9,0471	9,0471
1,00	145,1434	145,1434	-2,0824	-2,0825	7,5172	7,5172
2,00	35,4987	35,4987	-0,0020	-0,0020	5,4466	5,4467
3,00	15,4258	15,4258	1,2158	1,2158	4,2428	4,2428
4,00	-	8,4785	-	2,0807	-	3,3961
5,00	5,2986	5,2986	2,7524	2,7524	2,7468	2,7468
7,00	2,5725	2,5725	3,7676	3,7676	1,7891	1,7891
10,00	1,1636	1,1636	4,8497	4,8497	0,8242	0,8241
12,00	-	0,7629	-	5,4069	-	0,3598

Tabela B.11: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 3d. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).

r_c	Ref. E	E	Ref .S (Rnl)	S (Rnl)	Ref. S (Fnl)	S (Fnl)
0,10	-	1644,5299	-	-8,3971	-	11,9626
0,20	407,0429	407,0429	-6,3184	-6,3184	9,8834	9,8834
0,50	-	63,1602	-	-3,5716	-	7,1352
0,60	43,4051	43,4051	-3,0253	-3,0253	6,5884	6,5884
1,00	14,9675	14,9675	-1,4958	-1,4958	5,0570	5,0570
2,00	3,3275	3,3275	0,5755	0,5755	2,9814	2,9814
3,00	1,2928	1,2928	1,7828	1,7828	1,7708	1,7708
4,00	-	0,6214	-	2,6355	-	0,9159
5,00	0,3291	0,3291	3,2932	3,2932	0,2573	0,2573
7,00	0,0966	0,0966	4,2744	4,2744	-0,7202	-0,7202
10,00	-0,0071	-0,0071	5,2864	5,2864	-1,7059	-1,7059
12,00	-	-0,0312	-	5,7808	-	-2,1655

Tabela B.12: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 4d. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).

r_c	Ref. E	E	Ref .S (Rnl)	S (Rnl)	Ref. S (Fnl)	S (Fnl)
0,10	-	4115,5826	-	-8,6356	-	13,0266
0,20	1023,7974	1023,7974	-6,5566	-6,5566	10,9473	10,9473
0,50	-	161,3570	-	-3,8091	-	8,1976
0,60	111,4854	111,4854	-3,2626	-3,2626	7,6521	7,6522
1,00	39,3153	39,3153	-1,7320	-1,7320	6,1206	6,1206
2,00	9,3142	9,3142	0,3428	0,3428	4,0445	4,0445
3,00	3,9092	3,9092	1,5546	1,5546	2,8330	2,8330
4,00	-	2,0684	-	2,4132	-	1,9766
5,00	1,2397	1,2397	3,0783	3,0783	1,3157	1,3157
7,00	0,5457	0,5457	4,0798	4,0798	0,3300	0,3300
10,00	0,2024	0,2024	5,1406	5,1406	-0,6853	-0,6853
12,00	-	0,1100	-	5,6842	-	-1,1815

Tabela B.13: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 5d. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).

r_c	Ref. E	E	Ref .S (Rnl)	S (Rnl)	Ref. S (Fnl)	S (Fnl)
0,10	-	7569,5425	-	-8,7646	-	13,7022
0,20	1886,5823	1886,5823	-6,6854	-6,6854	11,6230	11,6230
0,50	-	299,0647	-	-3,9373	-	8,8763
0,60	207,0377	207,0377	-3,3906	-3,3906	8,3284	8,3286
1,00	73,6019	73,6019	-1,8591	-1,8591	6,7973	6,7973
2,00	17,8161	17,8161	0,2180	0,2180	4,7226	4,7225
3,00	7,6572	7,6572	1,4321	1,4321	3,5125	3,5125
4,00	-	4,1596	-	2,2932	-	2,6575
5,00	2,5672	2,5672	2,9608	2,9608	1,9980	1,9979
7,00	1,2122	1,2122	3,9672	3,9672	1,0145	1,0145
10,00	0,5213	0,5213	5,0349	5,0349	0,0005	0,0005
12,00	-	0,3280	-	5,5820	-	-0,4966

Tabela B.14: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 6d. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).

r_c	Ref. E	E	Ref .S (Rnl)	S (Rnl)	Ref. S (Fnl)	S (Fnl)
0,10	-	12009,7539	-	-8,8461	-	14,2036
0,20	2996,0881	2996,0881	-6,7668	-6,7668	12,1244	12,1244
0,50	-	476,3235	-	-4,0183	-	9,3790
0,60	330,0735	330,0735	-3,4715	-3,4715	8,8298	8,8296
1,00	117,8078	117,8078	-1,9395	-1,9395	7,2988	7,2988
2,00	28,8135	28,8135	0,1389	0,1389	5,2241	5,2241
3,00	12,5211	12,5211	1,3543	1,3543	4,0140	4,0140
4,00	-	6,8823	-	2,2165	-	3,1590
5,00	4,3013	4,3013	2,8853	2,8853	2,4995	2,4995
7,00	2,0885	2,0885	3,8939	3,8939	1,5156	1,5155
10,00	0,9447	0,9447	4,9642	4,9642	0,4991	0,4991
12,00	-	0,6193	-	5,5124	-	-0,0013

Tabela B.15: Valores do átomo de Hidrogênio confinado para o estado 7d. Todos os valores estão em unidades atômicas (u.a.).

r_c	Ref. E	E	Ref .S (Rnl)	S (Rnl)	Ref. S (Fnl)	S (Fnl)
0,10	-	17436,8188	-	-8,9025	-	14,6035
0,20	4352,4063	4352,4063	-6,8231	-6,8231	12,5243	12,5243
0,50	-	693,1197	-	-4,0744	-	9,7789
0,60	480,5768	480,5768	-3,5275	-3,5275	9,2296	9,2298
1,00	171,9177	171,9177	-1,9952	-1,9952	7,6985	7,6985
2,00	42,2967	42,2967	0,0839	0,0839	5,6236	5,6236
3,00	18,4942	18,4942	1,3001	1,3001	4,4133	4,4133
4,00	-	10,2312	-	2,1630	-	3,5580
5,00	6,4377	6,4377	2,8324	2,8324	2,8980	2,8980
7,00	3,1716	3,1716	3,8421	3,8421	1,9128	1,9128
10,00	1,4704	1,4704	4,9136	4,9136	0,8928	0,8928
12,00	-	0,9822	-	5,4623	-	0,3887

Apêndice C- Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (e_c^-) para: $l=0$; $l=1$ e $l=2$.

Resultados de uma Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (e_c^-) para $l=0$.

Tabela C.1: Valores da Energia (E) e Soma Entrópica (S_t) em função do raio de confinamento (r_c) para uma partícula confinada em uma gaiola esférica. Para comparar os nossos cálculos temos as referências de (E) e (S_t) do NASCIMENTO (2018,p. 66-68). Todos os valores em u.a.

n	Ref. E	E	Ref. S_t	S_t	r_c
1	0,1974	0,1974	6,6172	6,6172	5,0
2	0,7896	0,7896	8,1928	8,1926	5,0
3	1,7765	1,7765	9,0743	9,0744	5,0
4	-	3,1583	-	9,6866	5,0

Tabela C.2: Entropia de Shannon (S_r) e (S_p) em função do raio de confinamento (r_c) para a partícula confinada em uma gaiola esférica. Para comparar os nossos cálculos temos as referências de (S_r) e (S_p) NASCIMENTO (2018,p. 67). Todos os valores em u.a.

n	Ref. S_r	S_r	Ref. S_p	S_p	r_c
1	5,5039	5,5039	1,1133	1,1133	5,0
2	5,2900	5,2900	2,9029	2,9026	5,0
3	5,2136	5,2136	3,8608	3,8608	5,0
4	-	5,1743	-	4,5123	5,0

Resultados de uma Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (e_c^-) para $l=1$.

Tabela C.3: Valores da Energia (E) e Soma Entrópica (S_t) em função do raio de confinamento (r_c) para uma partícula confinada em uma gaiola esférica. Todos os valores em u.a.

n	E	S_t	r_c
1	0,4038	7,0300	5,0
1	0,4038	7,6437	5,0
2	1,1936	8,0757	5,0
2	1,1936	8,6894	5,0
3	2,3780	8,7387	5,0
3	2,3780	9,3524	5,0

Tabela C.4: Entropia de Shannon (S_r) e (S_p) em função do raio de confinamento (r_c) para a partícula confinada em uma gaiola esférica. Todos os valores em u.a.

n	S_r	S_p	r_c
1	5,3487	1,6813	5,0
1	5,6555	1,9882	5,0
2	5,0841	2,9916	5,0
2	5,3910	3,2985	5,0
3	4,9618	3,7770	5,0
3	5,2686	4,0838	5,0

Resultados de uma Partícula Confinada em uma Gaiola Esférica (e_c^-) para $l=2$.

Tabela C.5: Valores da Energia (E) e Soma Entrópica (S_t) em função do raio de confinamento (r_c) para uma partícula confinada em uma gaiola esférica. Todos os valores em u.a.

n	E	S_t	r_c
1	0,6643	7,6480	5,0
1	0,6643	8,0920	5,0
1	0,6643	8,0920	5,0
2	1,6544	8,4728	5,0
2	1,6544	8,9169	5,0
2	1,6544	8,9168	5,0

Tabela C.6: Entropia de Shannon (S_r) e (S_p) em função do raio de confinamento (r_c) para a partícula confinada em uma gaiola esférica. Todos os valores em u.a.

n	S_r	S_p	r_c
1	5,3808	2,2672	5,0
1	5,6028	2,4892	5,0
1	5,6028	2,4892	5,0
2	5,1421	3,3307	5,0
2	5,3641	3,5527	5,0
2	5,3641	3,5527	5,0

Bibliografia

A. F.R. de TOLEDO PIZA. **Mecânica Quântica**. EDUSP, São Paulo, 2003.

ALMEIDA, MARCOS M; GUIMARÃES, MARCÍLIO N; PRUDENTE, FREDERICO. V. Sobre o Confinamento Espacial de Sistemas Quânticos: O Oscilador Harmônico Unidimensional e o Átomo de Hidrogênio. In: **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v.27, n.3, p. 395-405, Julho 2005.

AZEVEDO, ÁLVARO F.M. **Método dos Elementos Finitos**. Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, Portugal. 1ª Edição, Abril 2003.

BORGES, ERNESTO P. Irreversibilidade, Desordem e Incerteza: Três Visões da Generalização do Conceito de Entropia. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v.21,n. 4, p. 453, Dezembro 1999.

BORN, MAX. **Física Atômica**. Lisboa: Fundação Calouste Gulbenkian, 1968.

COSTA L. S; PRUDENTE F. V. Simulação Computacional em Gases. In: **IX Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica**, ed. Vianna J. D. M., Livraria de Física, São Paulo (2007).

COURTIELLE, Ph. W. **Física Atômica e Molecular**. Aulas de Física para Pós-Graduação da Universidade de São Paulo – Instituto de Física de São Carlos. Novembro de 2017

GLEICK, J. **A Informação: Uma história, uma teoria, uma enxurrada**. São Paulo: Companhia da Letras, 2013.

GOLDMAN, SAUL; JOSLIN, CHRIS. Spectroscopic Properties of an Isotropically Compressed Hydrogen Atom. **J. Phys. Chem. In Final Form**: Mach 24, 1992.

GRIFFITHS, D. J. **Mecânica Quântica**. Sao Paulo: Pearson Prentice Hall, 2011.

GUILLOT, T. **Space** . 47 (1999) 1183.

GUILLOT, T. Annu. **Rev. Earth Planet Sci.**, 33 (2005) 493.

GUIMARÃES, MARCÍLIO NUNES. **Estudo de Sistemas Quânticos Usando o Método do Elemento Finito: Sistema Confinado e Processos de Espelhamentos**. 2007. Dissertação (Mestrado em Física) - Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, Salvador-BA, 2007.

GUIMARÃES, MARCÍLIO NUNES; PRUDENTE, FREDERICO V. A Study of the Confined Hydrogen Atom Using the Finite Element Method. **Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics**. Published 25 July 2005.

HALLIDAY, RESNICK. **Fundamentos de Física: Gravitação, Ondas e Termodinâmica**. Tradução e Revisão: Ronaldo Sérgio de Bias. Editora: LTD, Rio de Janeiro, 2009.

HARTLEY, R. V. L. Transmission of information. **Bell Syst. Tech. J.**, v. 7, p. 536, 1928.

JIAO, LI GUANG; ZAN, LI RONG ZAN; ZHANG, YONG ZHI; HO, YEW KAM. Benchmark Values of Shannon Entropy for Spherically Confined Hydrogen Atom. **International Journal Quantum Chemistry**. Accepted: 6 March 2017.

JIAO, LI GUANG; ZAN, LI RONG ZAN; ZHANG, YONG ZHI; HO, YEW KAM. **Supporting Information: Benchmark Values of Shannon Entropy for Spherically Confined Hydrogen Atom**. 16 February 2017.

LAGE, E. J. S. **Física Estatística**. Fundação Calouste Gulbenkian – Lisboa. 1995.

LOTTI, RAQUEL S.; MACHADO, ANDRÉ WILSON; MAZZIEIRO, ÊNIO TONANI; JÚNIOR, JAMES LANDRE. **Aplicabilidade Científica do Método dos Elementos Finitos**. R Dental Press Ortodon Ortop Facial. Maringá, V.11,n.2, p.35-43, Mar/Abril 2006.

LUZZI, ROBERTO. **Mecânica Estatística: Ensembles Clássicos em Equilíbrio**. Notas de Aula IFGW. Volume :1, Unicamp Campinas, São Paulo, 1991.

MANIERO, ANGELO MARCONI. **Notas de Aula do Curso Introdução à Mecânica Quântica**. Salvador-BA, 2006.

NASCIMENTO, WALLAS SANTOS. **Sobre Algumas Características da Entropia de Shannon para Sistemas Atômicos Confinados** . Dissertação (Mestrado em Física)- Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia, Salvador, Junho 2013.

NASCIMENTO, WALLAS SANTOS. **Sobre um Estudo de Sistemas Quânticos Confinados Inspirado na Teoria da Informação**. Tese (Doutorado em Física)- Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia, Salvador, Outubro 2018.

NASCIMENTO, WALLAS S; PRUDENTE, FREDERICO V. Sobre um Estudo da Entropia de Shannon no Contexto da Mecânica Quântica: Uma Aplicação ao Oscilador Harmônico Livre e Confinado. In. **Revista Química Nova**, v.39, n.6, p. 757-764, Março 2016.

NOVAES, MARCELO;STUDART, NELSON. **Mecânica Quântica Básica**. Série MNPEF. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2016.

NUSSENZVEIG, H. M. **Curso de Física Básica**. Volume 2. 4ª Edição, São Paulo: Blucher, 2002.

NYQUIST, H. Certain factors affecting telegraph speed. **Bell Syst. Tech. J.**, v.3, p. 324, 1924.

PATHRIA, R. K. **Statistical Mechanics**. Oxford: Pergamon Press, 1972.

PINEDA, JOSÉ OCTÁVIO. **A Entropia Segundo Claude Shannon: O Desenvolvimento do Conceito Fundamental da Teoria da Informação**. Dissertação (Mestrado em História da Ciência) – Pontifícia Universidade Católica, São Paulo, 2006.

PRESS, WILLIAM H; TEUKOLSKY, SAUL A; VETTERLING, WILLIAM T; FLANNERY, BRIAN P. **Numerical Recipes in Fortran 77**. Volume 1 of Fortran Numerical Recipes 1996,1997.

PRUDENTE, FREDERICO V. **Superfícies de Energia Potencial e Dinâmica Molecular**. 1999. Tese de Doutorado- Instituto de Física, Universidade de Brasília, Brasília-DF, Setembro 1999.

PRUDENTE, FREDERICO V; SOARES, NETO J. J. **Chem. Phys. Lett**, 302 (1999) 43.

RICCI, MÁRIO CÉSAR TAVARES; SILVA, ANDRÉ GUILHERME DA SILVA. **Métodos dos Elementos Finitos: Seminário de Dinâmica Orbital I-** CMC-203-D. São José dos Campos, 2005.

SHANNON, C. E. A mathematical theory of communication. **Bell Syst. Tech. J.**, v. 27, p. 379–423, 623–656, 1948.

SILVA; ANDRÉ LUIZ BONFIM BATHISTA. **Introdução a Química Quântica.** Universidade de São Paulo (Instituto de Física de São Carlos), 2013.

VIANNA, J. D. M.; FAZZIO, A.; CANUTO, S. **Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos: Simulação Computacional.** Livraria de Física, São Paulo (2004).

YAÑEZ, R. J; FÉREZ, R. GONZÁLES; DEHESA, JESÚS S. Entropic Integrals of Hyperspherical Harmonics and Spatial Entropy of D-dimensional Central Potential. **Journal of Mathematical Physics** **40**. Published Online: 26 October 1999.