UNIVERSIDADE ESTADUAL DE FEIRA DE SANTANA
Autorizada pelo Decreto Federal nº 77.496 de 27/04/76
Recredenciamento pelo Decreto nº17.228 de 25/11/2016
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
COORDENAÇÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

XXVIII SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UEFS
SEMANA NACIONAL DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA - 2024

Aplicação do Método Nikiforov-Uvarov à Equação de Schrödinger para o Potencial Hiperbólico Pöschl-Teller

Albert Wendler Lemos Serra[1]; Álvaro Santos Alves[2]
1. Bolsista – Modalidade Bolsa/PVIC, Graduando em Bacharelado em Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: albert_wendler@hotmail.com
2. Orientador, Departamento de Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: asa@uefs.br

PALAVRAS-CHAVE: Equação de Schrödinger; Método Nikiforov-Uvarov; Potencial Pöschl-Teller.

INTRODUÇÃO

A equação de Schrödinger desempenha um papel central na mecânica quântica não relativística, pois permite determinar o espectro de energia e a evolução temporal dos estados quânticos de sistemas físicos submetidos a diversos tipos de potenciais [1]. Segundo a interpretação de Copenhagen, a função de onda, em qualquer instante de tempo, contém todas as informações possíveis sobre as propriedades de um sistema físico[4]. Vale ressaltar que, em se tratando de aplicações, diversos potenciais quânticos modelam sistemas físicos, químicos e biológicos, por isso são bastante estudados. Logo, obter a solução da equação de Schrödinger para um dado potencial é crucial para a descrição quântica de uma gama de sistemas físicos, sobretudo sistemas moleculares. Nesse sentido, os potenciais hiperbólicos foram pensados para superar dificuldades introduzidas pelo potencial de Morse na descrição quântica de moléculas diatômicas. Desde então, diversas soluções da equação de Schrödinger radial foram propostas para momento angular não nulo. Por fim, esta proposta de plano de trabalho visa investigar os estados ligados em um sistema quântico para o potencial hiperbólico, usando o método de Nikiforov-Uvarov. Além disso, propõe-se descrever os estados coerentes no referido potencial, cuja importância é fundamental no desenvolvimento de dispositivos ópticos-eletrônicos.

MATERIAL E MÉTODOS OU METODOLOGIA (ou equivalente)

Existem muitos métodos diferentes para solucionar a ES, no entanto, o presente trabalho propõe-se resolver analiticamente a equação de Schrödinger para o potencial hiperbólico Pöschl-Teller utilizando o método de Nikiforov-Uvarov (NU), isto é, a solução será determinada a partir da resolução de equações diferenciais hipergeométricas e das condições de contorno estabelecidas para o problema.

O método Nikiforov-Uvarov foi apresentado pela primeira vez pelos matemáticos russos Vasily Borisovich Uvarov e Arnold Fedorovich Nikiforov, publicado em 1988 no livro Funções Especiais da Física Matemática. O método se baseia na resolução de uma equação diferencial de ordem dois do tipo hipergeométrica:

$$\psi''(s) + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)}\psi'(s) + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)}\psi(s) = 0 \tag{2}$$

Onde $\sigma(s)$ e $\tilde{\sigma}(s)$ são polinômios são polinômios de grau 2, no máximo, $\tilde{\tau}(s)$ é um polinômio de grau máximo 1 e ψ(s) é uma função do tipo hipergeométrica [2]. Fazendo uma transformação da função $\psi(s) = \phi(s)y(s)$, escrevemos uma equação mais simplificada dada por:

$$y''(s) + \frac{\tau(s)}{\sigma(s)}y'(s) + \frac{\bar{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)}y(s) = 0 \tag{3}$$

Com

$$\frac{\phi'(s)}{\phi(s)} = \frac{r(s)}{\sigma(s)}$$

$$\tau(s) = 2r(s) + \tilde{\tau}(s)$$

$$r(s) = \frac{\sigma'(s)-\tau(s)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'(s)-\tau(s)}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma}(s) + k\sigma(s)} \tag{4}$$

e

$$k = \lambda - r'(s) \tag{5}$$

É possível determinar k tomando o discriminante da expressão sob o sinal de raiz, na eq. (4), igual a zero, dessa forma, quatro valores para $r(s)$ serão encontrados, dentre estes, aquele que fará $\tau'(s) < 0$ terá significado físico coerente.

Se $\bar{\sigma}(s) = \lambda\sigma(s)$, escrevemos (3) em sua forma reduzida

$$\sigma(s)y''(s) + \tau(s)y'(s) + \bar{\sigma}(s)y(s) = 0 \tag{6}$$

Onde $y(s)$ é calculado por meio da fórmula de Rodrigues:

$$y_n(s) = \frac{B_n}{\rho(s)}\left[\sigma^n(s)\rho(s)\right]^{(n)}; \quad (n = 0, 1, 2...)$$

Sendo B_n a constante de normalização e $\rho(s)$ a função peso que satisfaz a relação:

$$(\sigma(s)\rho(s))' = \tau(s)\rho(s)$$

Através da n-ésima derivada de (3), sua solução trivial nos faz encontrar:

$$\lambda_n = -\frac{n(n-1)}{2}\sigma''(s) - n\tau'(s) \tag{7}$$

Os autovalores de energia são obtidos ao comparar (5) com (7).

RESULTADOS E/OU DISCUSSÃO (ou Análise e discussão dos resultados)

A equação de Schrödinger (ES), responsável por determinar a função de onda $\psi(\vec{r}, t)$ que contém toda a informação da partícula experimentada [4], foi fruto do trabalho do físico austríaco Erwin Schrödinger em meio a formulação da mecânica quântica no século passado (1925), a ES independente do tempo unidimensional para o potencial hiperbólico $V(x) = -V_0 sech^2(\alpha x)$ é descrita por:

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}[E + V_0 sech^2(\alpha x)]\psi(x) = 0 \tag{3}$$

Fazendo uma transformação apropriada encontramos:

$$\psi''(s) - \frac{-2s}{(1-s^2)}\psi'(s) + \frac{[-\beta^2+\gamma^2(1-s^2)]}{(1-s^2)^2}\psi(s) = 0 \tag{21}$$

E aplicando o método Nikiforov-Uvarov, é possível encontrar como solução os autoestados:

$$\psi_n(s) = C_n(1 - s^2)^{\frac{\beta}{2}} P_n^{(\beta,\beta)}(s) \tag{4}$$

Onde $P_n^{(\beta,\beta)}(s)$ são os polinômios de Gengenbauer, caso particular dos polinômios de Jacobi. Os autovalores de energia são obtidos:

$$E_n = -\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}\beta_n^2 \quad | \quad \beta_n = -n + \frac{1}{2} + \sqrt{\gamma^2 + \frac{1}{4}}; \quad (\beta_n > 0) \tag{5}$$

CONSIDERAÇÕES FINAIS (ou Conclusão)

A resolução da equação de Schrödinger utilizando o método Nikiforov-Uvarov revela-se uma abordagem poderosa e relevante para a compreensão de sistemas quânticos exatamente solúveis. A aplicação do método permitiu a obtenção de soluções analíticas para os autovalores e as funções de onda, oferecendo uma maneira eficaz de explorar as características do potencial, que tem ampla aplicação em diversas áreas da física, como a física molecular, a física de partículas e a teoria de campos.

A importância dessa resolução reside não apenas na obtenção de soluções exatas, mas também no fato de que ela fornece um entendimento mais profundo sobre a estrutura dos níveis de energia e a dinâmica quântica dos sistemas modelados pelo potencial Pöschl-Teller. Essas soluções exatas servem como modelos para testar aproximações e métodos numéricos em situações mais complexas, além de auxiliar no desenvolvimento de novos potenciais e técnicas em mecânica quântica.

O uso do método Nikiforov-Uvarov se destaca por sua generalidade e eficiência na resolução de equações diferenciais de segunda ordem, sendo aplicável a uma ampla gama de problemas em física matemática. Portanto, a aplicação desse método para resolver a equação de Schrödinger com o potencial Pöschl-Teller não apenas contribui para a teoria dos sistemas exatamente solúveis, mas também estabelece um ponto de partida para futuras pesquisas em tópicos avançados de mecânica quântica e suas aplicações em áreas tecnológicas emergentes.

REFERÊNCIAS

[1] SANTOS, Felipe Duarte; AMORIM, António; BATISTA, João. Mecânica Quântica. Lisboa: Fundação Calouste Gulbenkian, 2008.

[2] NIKIFOROV, Arthur F.; UVAROV, Vasilii B. Special Functions of Mathematical Physics: a unified introduction with applications. Basel: Springer Basel Ag, 1998.

[3] GRIFFITHS, David J. Mecânica Quântica. 2. ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2011 [4] FEYNMAN, Richard Phillips; LEIGHTON, Robert B.; SANDS, Matthew. The Feynman Lectures on Physics. Massachusetts: Addison-Wesley, 1965.

[4] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. LaloÎ, Quantum Mechanics (Wiley, New York 1977)

[5] EISBERG, Robert; RESNICK, Robert. Física quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas. 4. ed. Rio de Janeiro: Campus, 1986.

[6] Tang, C.L. (2005). Fundamentals of Quantum Mechanics: For Solid State Electronics and Optics, Cambridge University Press, ISBN-13 978-0-521-82952-6, Cambridge.

[7] Levine, I.N. (2008). Quantum Chemistry, Prentice Hall, ISBN: 978-0136131069.

[8]Flugge, S. (1971). Practical Quantum Mechanics II, Springer, Berlin.

[9] OLIVEIRA, Edmundo Capelas de. Funções Especiais com Aplicações. 2. ed. São Paulo: Livraria da Física, 2012.

[10] BOAS, Mary L. Mathematical Methods in the Physical Sciences. 3. ed. New York: Wiley, 2005.

[11] ARFKEN, George B.; WEBER, Hans J.; HARRIS, Frank. Mathematical Methods for Physicists. 5. ed. San Diego: Harcourt/Academic Press, 1996.

[12] WOLNEY FILHO, Waldemar. Mecânica Quântica. Goiânia: Editora UFG, 2002.

[13] PESSOA JUNIOR, Osvaldo. Conceitos de Física Quântica. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2003.

[14] OLIVEIRA, Ivan S. Física quântica: fundamentos, formalismo e aplicações. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2020.

[15] M. Velloso, V. Acioly, A. C. F. Santos. Revista Brasileira de Ensino de Física, vol. 42, e20200209 (2020).

[16] B.H. Bransden e C.J. Joachain, Physics of atoms and molecules (Person Education, Essex, 2002), 2a ed.

[17] G.C. Schatz e M.A. Ratner, Quantum Mechanics in Chemistry (Dover, Mineola, New York, 2001).

[18] SZEGŐ, Gabor. *Orthogonal Polynomials*. New York: American Mathematical Society, 1939. (Colloquium Publications, v. 23).

[19] Karayer, H., Demirhan, D., & Büyükkılıç, F. (2018). Solution of Schrödinger equation for two different potentials using extended Nikiforov-Uvarov method and polynomial solutions of biconfluent Heun equation. Journal of Mathematical Physics, 59(5), 053501. doi:10.1063/1.5022008