



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE FEIRA DE SANTANA

Autorizada pelo Decreto Federal nº 77.496 de 27/04/76
Recredenciamento pelo Decreto nº 17.228 de 25/11/2016



PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
COORDENAÇÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

XXVI SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UEFS SEMANA NACIONAL DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA - 2022

ESTUDO ANALÍTICO DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER PARA POTENCIAIS UNIDIMENSIONAIS UTILIZANDO O MÉTODO DE NIKIFOROV-UVAROV

Viviane Brandão S. Leite¹ e Álvaro Santos Alves²

1. Bolsista PROBIC/UEFS, Graduanda em Bacharelado em Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: ybsleite@uesc.br
2. Orientador, Departamento de Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: asa@uefs.br

PALAVRAS-CHAVE: Equação de Schrödinger; Método de Nikiforov-Uvarov;
Potenciais unidimensionais.

INTRODUÇÃO

A solução da equação de Schrödinger para um sistema físico em Mecânica Quântica é de grande importância, porque o conhecimento da função de onda $\Psi(\vec{r}, t)$ e da energia E contém todas informações possíveis sobre as propriedades físicas do mesmo (Schrödinger, 1926). Muitas vezes acontece em alguns sistemas que a solução da equação de Schrödinger com um dado potencial $V(r)$ não é conhecida com precisão (por exemplo, ao considerar o movimento de uma partícula sujeita ao potencial de Morse juntamente com o termo centrífugo $l(l + 1)/r$ vindo da parte radial da equação de Schrödinger em coordenadas esféricas). Portanto, nesses casos, devemos nos contentar com uma solução aproximada. Para superar vários tipos de problemas em buscar de soluções exatas (ou aproximadas), temos que aplicar vários métodos (numéricos e/ou analíticos) para resolver a equação de Schrödinger de forma adequada.

Recentemente, tem havido um interesse renovado na resolução de sistemas mecânicos quânticos no âmbito do método de Nikiforov-Uvarov (NU). Tal método foi introduzido pelos matemáticos russos Vasily Borisovich Uvarov e Arnold Fedorovich Nikiforov e publicado, em 1988, no livro *Funções Especiais da Física Matemática* (Nikiforov & Uvarov, 1988). Esta técnica algébrica é baseada na resolução de equações diferenciais de segunda ordem do tipo hipergeométrico por meio das funções ortogonais especiais (Sezgo, 1939). Para um determinado potencial central $V(r)$, a equação de Schrödinger independente do tempo em coordenadas esféricas – ou, de forma geral, a equação de Helmholtz homogênea – é reduzida a uma equação generalizada do tipo hipergeométrico com uma transformação de coordenadas $r \rightarrow s$ e, então, ela pode ser resolvida sistematicamente para encontrar uma solução exata ou aproximada (Büyükkilic, 1997).

Nesse sentido, o método de NU é introduzido de modo a resolver a equação de Schrödinger e, assim, determinar o espectro de energia e a evolução temporal dos estados

quânticos de sistemas físicos (Flügge, 1971). Diferentes técnicas costumam ser utilizadas para esse fim, tais como métodos variacionais, da série de potências, de fatoração, análise de Fourier e abordagens teóricas do grupo de Lie (Tang, 2005). Destarte, o objetivo desse trabalho é utilizar o método de NU para obter as soluções analíticas da equação de Schrödinger para os potenciais unidimensionais: harmônico, coulombiano, de Kratzer, de Morse e o de Hulthen. Os resultados obtidos são interpretados e comparados com aqueles encontrados na literatura a partir de outros métodos para cada potencial mencionado.

METODOLOGIA

Este trabalho está fundamentado na Teoria Quântica e seu desenvolvimento se deu a partir duma metodologia baseada no método de NU. A principal equação associada a esse método é

$$\psi''(s) + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)}\psi'(s) + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)}\psi(s) = 0, \quad (1)$$

onde $\sigma(s)$ e $\tilde{\sigma}(s)$ são polinômios de grau dois, no máximo, $\tilde{\tau}(s)$ é um polinômio de grau máximo um e $\psi(s)$ é uma função do tipo hipergeométrica. Para encontrar a solução particular de (1), pode-se usar a seguinte transformação $\psi(s) = \phi(s)y(s)$ levando à equação do tipo hipergeométrica na forma reduzida

$$\sigma y''(s) + \tau(s)y'(s) + \lambda y = 0, \quad (2)$$

onde $y(s)$ satisfaz a relação de Rodrigues

$$y_n(s) = \frac{B_n}{\rho(s)} \frac{d^{(n)}}{ds^{(n)}} [\sigma^{(s)} \rho(s)]. \quad (3)$$

Na equação (3) acima, B_n é a constante de normalização e $\rho(s)$ é a função peso, cumprindo a condição

$$(\sigma(s)\rho(s))' = \tau(s)\rho(s). \quad (4)$$

Além disso,

$$\frac{\phi'(s)}{\phi(s)} = \frac{r(s)}{\sigma(s)}, \quad (5)$$

$$\tau(s) = \tilde{\tau}(s) + 2r(s), \quad (6)$$

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

em que

$$r(s) = \frac{-\tilde{\tau}(s) + \sigma'(s)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\tilde{\tau}(s) - \sigma'(s)}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma}(s) - k\sigma(s)}, \quad k = \lambda - r'(s). \quad (8)$$

Aqui, $r(s)$ é um polinômio de grau um, no máximo. A determinação de k é o ponto essencial no cálculo de $r(s)$, para o qual o discriminante da raiz quadrada em (8) é igual

a zero. Muitos dos cálculos do modelo NU devem lidar com uma comparação dos valores λ_n e λ , em (7) e (8) respectivamente, para extrair o espectro de energia para um potencial de interesse. A questão mais significativa nesta fase é a derivada de $\tau(s)$ em (6) que deve ser negativa para reproduzir valores λ_n positivos – fisicamente aceitáveis.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Tendo em conta o algoritmo padrão do formalismo de NU, temos a transformação da equação radial de Schrödinger independente do tempo

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right] R(r) = 0 \quad (9)$$

para uma com a forma da equação (1). No entanto, salienta-se que será considerado um esquema de mudança de coordenadas $r \rightarrow s$ mais geral, manipulada a depender de como o potencial estudado está estabelecido.

Especificamente, para o potencial do oscilador harmônico, temos o espectro de energia

$$E_{n_p} = \left(n_p + \frac{3}{2} \right) \hbar, \quad (11)$$

onde $n_p = 2n + l$ é o número quântico principal. Sendo $\psi(s) \equiv rR(r)$, com as transformações $r = \alpha\zeta$ e $\zeta^2 = s$, também encontramos

$$\psi(s) = N_{nl} s^{\delta_1} e^{-s/2} L_n^{\delta_2}(s), \quad (12)$$

com

$$\delta_1 = \frac{(l+1)}{2}, \quad \delta_2 = l + \frac{1}{2}.$$

Procedimento análogo foi usado para encontrar a função de onda radial $R(r)$ e os espectros de energia para os potenciais de Coulomb (13), de Kratzer (14), de Morse (15) e o de Hulthen (16) como seguem

$$E_{n_p} = -\frac{Z^2 \mu e'^2}{2n_p^2 \hbar^2}, \quad \psi(s) = N_{nl} s^l e^{-\sqrt{\alpha}s} L_n^{2l+1}(2s\sqrt{\alpha}s), \quad (13)$$

$$\alpha = \frac{-2E}{ae'^2}.$$

$$E_{nl} = A - \frac{\frac{\mu B^2}{2\hbar^2}}{\left(n + \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{2\mu C}{\hbar^2} + \left(l + \frac{1}{2} \right)^2} \right)^2}, \quad (14)$$

$$\psi(s) = N_{nl} s^{\frac{-1+\sqrt{1+4\gamma}}{2}} e^{-\sqrt{\alpha}s} L_n^{\sqrt{1+4\gamma}}(2\sqrt{\alpha}s),$$

$$\alpha = -\frac{2\mu(E - A)}{\hbar^2}, \quad \gamma = \frac{2\mu C}{\hbar^2} + l(l + 1).$$

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2 l(l + 1)}{2\mu r_e^2} \left(1 - \frac{3}{ar_e} + \frac{3}{a^2 r_e^2}\right) - \frac{\hbar^2 a^2}{2\mu} \left[\frac{\beta}{2\sqrt{\gamma}} - \left(n + \frac{1}{2}\right)\right]^2, \quad (15)$$

$$\psi(s) = N_{nl} s^{\sqrt{\alpha}} e^{-\sqrt{\alpha}s} L_n^{2\sqrt{\alpha}}(2\sqrt{\gamma}s),$$

$$\frac{\beta}{2\sqrt{\gamma}} = \frac{1}{a^2 \sqrt{\gamma}} \left[\frac{2\mu D_e}{\hbar^2} - \frac{l(l + 1)}{r_e^2} \left(\frac{2}{ar_e} - \frac{3}{a^2 r_e^2} \right) \right],$$

$$\alpha = -\frac{2\mu r_e^2 (E_{nl} - \eta D_0)}{\hbar^2 \delta^2}, \quad \gamma = \frac{2\mu r_e^2 (D_e + \eta D_2)}{\hbar^2 \delta^2}, \quad \delta = ar_e.$$

$$E_{nl} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{(K\mu/\hbar^2)}{n + l + 1} - \frac{n + l + 1}{2k} \right]^2, \quad (16)$$

$$\psi(s) = N_{nl} s^{\sqrt{\alpha}} (1 - s)^{l+1} P_n^{(2\sqrt{\alpha}, 2l+1)}(1 - 2s),$$

$$\alpha = -\frac{2\mu Ek}{\hbar^2}.$$

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste projeto conseguimos utilizar o método de NU para obter adequadamente as soluções analíticas da equação de Schrödinger para os potenciais unidimensionais: harmônico, coulombiano, de Kratzer, de Morse e o de Hulthen. A solução significou que alcançamos o espectro de energia e a função de onda correspondente de uma partícula sujeita a cada um desses potenciais. Ademais, constatamos que o método de NU se destaca por ser capaz de encontrar a solução da equação de Schrödinger de forma mais direta e elegante quando comparado aos demais.

REFERÊNCIAS

- SCHRÖDINGER, E. (1926). *Naturwiss*, 14, 664.
- NIKIFOROV, A.V. & UVAROV, V.B. (1988). *Special Functions of Mathematical Physics*, Birkhauser, Bassel.
- SEZGO, G. (1939). *Orthogonal Polynomials*. American Mathematical Society, New York.
- BÜYÜKKILIC, F.; EGRIFES, H. & DEMIRHAN, D. (1997). *Solution of the Schrödinger equation for two different molecular potentials by the Nikiforov-Uvarov method*. *Theo. Chem. Acc.*, 98, (192-196).
- FLÜGGE, S. (1971). *Practical Quantum Mechanics II*, Springer, Berlin.
- 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.