



**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 HIPERBÓLICOS UTILIZANDO O MÉTODO DE NIKIFOROV-UVAROV**

**Viviane B. Leite<sup>1</sup> e Álvaro Santos Alves<sup>2</sup>**

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

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

#### **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 (centrais, hiperbólicos e trigonométricos): Kratzer (Kratzer, 1920), Scarf (Scarf, 1958), Poschl-Teller (Pöschl; Teller, 1933) e Rosen-Morse. 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  $\lambda_n$  e  $\lambda$ , 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  $\lambda_n$  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 de Kratzer (10), caso geral do potencial de Coulomb, de Scarf (11), caso geral do potencial de Poschl-Teller, de Rosen-Morse (12) como seguem

$$V(r) = A - \frac{B}{r} + \frac{C}{r^2}, \quad (10)$$

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

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

$$V_t(z) = -a^2 + (a^2 + b^2 - a) \sec^2(\alpha z) - b(2a + \alpha)(\alpha z) \sec(\alpha z), \quad (11)$$

$$\psi_n = (1 - \sin(\alpha z))^{\frac{(a-b)}{2\alpha}} ((1 + \sin(\alpha z))^{\frac{(a+b)}{2\alpha}} P_n^{(b/\alpha - a/\alpha - 1/2), (-b/\alpha - a/\alpha - 1/2)}(z))$$

$$E_n = (a + n)^2 - a^2$$

$$V(z) = a^2 + \frac{b^2}{a^2} - a(a + 1)^2(z) + 2b \tanh(z), \quad (12)$$

$$g_n(x) = \sqrt{(1-x)_n^\mu (1+x)_n^\nu} P_n^{(\mu, \nu)}(x)$$

$$E_n = \frac{b^2}{a^2} - (a - n)^2 - \frac{b^2}{(a - n)^2}$$

## CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste projeto, conseguimos utilizar o Método de NU de forma eficaz para obter soluções analíticas precisas da equação de Schrödinger, aplicada a potenciais unidimensionais hiperbólicos, tais como o Scarf, Poschl-Teller, Rosen-Morse, e também ao potencial central de Kratzer. Esta abordagem nos permitiu determinar com sucesso os espectros de energia e as funções de onda correspondentes para partículas interagindo com esses potenciais. Além disso, observamos que o Método de NU se destaca pela sua capacidade de encontrar soluções de forma mais direta e elegante em comparação com outros métodos.

Os potenciais hiperbólicos desempenham um papel crucial na descrição de variações energéticas ao longo de uma dimensão espacial de forma hiperbólica. São fundamentais para a compreensão de fenômenos como barreiras de potencial e poços quânticos, com aplicações significativas em áreas como semicondutores e tunelamento quântico. Por outro lado, os potenciais centrais referem-se a sistemas nos quais a força depende exclusivamente da distância radial em relação a um ponto central. Isso é especialmente relevante em sistemas atômicos, onde a atração núcleo-elétron segue uma lei de força central. A compreensão desses potenciais é essencial para descrever o comportamento de partículas em sistemas físicos complexos, fornecendo a base teórica para a modelagem e predição de uma ampla variedade de fenômenos quânticos. Portanto, a obtenção da solução analítica para esses potenciais é de suma importância.

## REFERÊNCIAS

- SCHRÖDINGER, E. (1926). *Naturwiss*, 14, 664.
- NIKIFOROV, A.V. & UVAROV, V.B. (1988). *Special Functions of Mathematical Physics*, Birkhauser, Basel.
- 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.
- KRATZER, A. (1920). *Z. Physik*, 3, 289.
- SCARF, F. (1958) *Phys. Rev.* 112, 1137.
- POSCHL, G.; TELLER, E. (1933). *Z. Phys.* 83, 143.