

Soluções variacionais e numéricas da Equação de Schrödinger 1D submetida ao potencial de Pöschl-Teller

Lucas Carvalho Pereira ^[1], João Vítor Batista Ferreira ^[2], Valter Aragão do Nascimento ^[3]

[1] lukas.cp@gmail.com. [2] joao.ferreira@ufms.br. Universidade Federal de Mato Grosso do Sul - Instituto de Física.

[3] aragao60@hotmail.com. Universidade Federal de Mato Grosso do Sul - Faculdade de Medicina.

RESUMO

Neste trabalho apresentamos as soluções variacionais e numéricas da Equação de Schrödinger 1D submetida ao potencial de Pöschl-Teller. Os métodos utilizados foram o Método Variacional e o Método das Diferenças Finitas. Estes foram abordados de maneira didática e detalhada com o intuito de instruir os discentes, tanto da graduação quanto da pós-graduação, sobre a aplicabilidade e eficácia dos métodos supracitados. Utilizamos o potencial de Pöschl-Teller devido ao fato de ser pouco explorado nos livros de Mecânica Quântica utilizados na graduação e também por causa das diversas aplicações como, por exemplo, em Condensados de Bose-Einstein, guias de onda, defeitos topológicos em teoria de campos, etc. Concluímos este artigo comparando as soluções variacionais e numéricas com a solução analítica e apresentamos as vantagens de cada método.

Palavras-chave: Potencial de Pöschl-Teller. Método Variacional. Método das Diferenças Finitas.

ABSTRACT

This paper presents the numerical and variational solutions of the 1D Schrödinger Equation submitted to the Pöschl-Teller potential. The methods used were the Variational Method and the Finite Difference Method. They were presented in a didactic and detailed way with the purpose of instructing both undergraduate and graduate students, about the applicability and effectiveness of the aforementioned methods. We use the Pöschl-Teller potential due to the fact that it is little explored in the books of Quantum Mechanics used in undergraduate courses and also because of its diverse applications, such as in Bose-Einstein condensates, waveguides, topological defects in field theory and so on. We conclude this paper comparing the variational and numerical solutions with the analytical solution and present the advantages of each method.

Keywords: *Pöschl-Teller Potential. Variational Method. Finite Difference Method.*

1 Introdução

É conhecido que as soluções exatas da Equação de Schrödinger (ES) relativística e não relativística para alguns potenciais físicos é de extrema importância, pois elas contêm basicamente todas as informações necessárias para o sistema quântico.

Soluções exatas obtidas analiticamente da ES para determinados potenciais, como o poço infinito, oscilador harmônico, Morse, Pöschl-Teller, Kratzer, entre outros (ALMEIDA; GUIMARÃES; PRUDENTE, 2005; CONTRERAS-ASTORGA; CABRERA, 2007; DURMUS, 2015; PIMENTEL; CASTRO, 2013; PIMENTEL; CASTRO, 2014), têm importantes aplicações em física do estado sólido, física molecular, atômica, nuclear, física de partículas e no estudo de estruturas *kink* (ARAUJO; BORGES; DRIGO FILHO, 2006; ASHCROFT; MERMIN, 1976; BAZEIA *et al.*, 2018; EISBERG; RESNICK, 1983; KITTEL, 1976; SUMARYADA; PUTRA; PRAMUDITO, 2017).

Entre os potenciais citados acima, o presente trabalho dedica-se a explorar o potencial de Pöschl-Teller. Estudos recentes desse potencial evidenciam aplicações em diversas áreas, tais como física do estado sólido (GASANOV *et al.*, 2019), soluções analíticas do Hamiltoniano de Bohr (HAMMOU *et al.*, 2019), potenciais de confinamento em Condensados de Bose-Einstein (BORDAG, 2019; SARATH; VINODKUMAR, 2015), guias de ondas ópticas (HARTMANN; PORTNOI, 2017), mecânica quântica relativística (PRATIWI *et al.*, 2017), Equação de Schrödinger D-Dimensional (ASSI; IKOT; CHUKWUOCHA, 2018), entre outras.

Este trabalho tem como propósito determinar a energia do estado fundamental – e sua respectiva autofunção – de um sistema quântico governado pelo potencial de Pöschl-Teller através de métodos analíticos e numéricos, com os quais alunos de graduação em Física já tiveram um primeiro contato em disciplinas como Física Computacional, Física Matemática e Mecânica Quântica (BRAGA, 2006; GRIFFITHS, 2005; RUGGIERO; LOPES, 1996).

Apesar de a Equação de Schrödinger submetida ao potencial de Pöschl-Teller apresentar solução analítica, optou-se, além desta, por buscar soluções por meio de outros métodos. Assim, o discente terá a capacidade de contemplar a aplicação e a validade de cada método bem como de avaliar a eficácia de cada um.

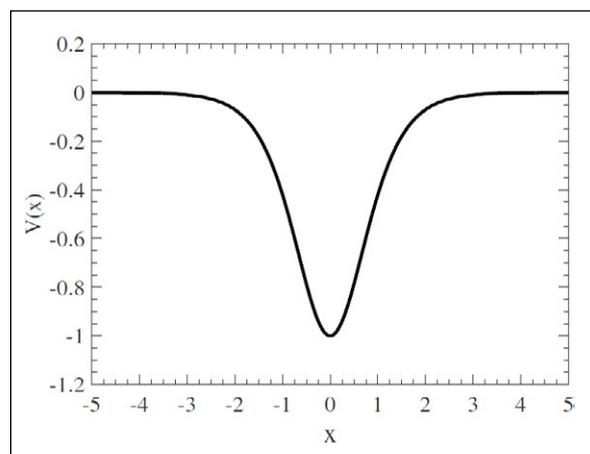
O trabalho está organizado como segue. Na seção 2, o potencial de Pöschl-Teller é descrito

mais detalhadamente e algumas características são abordadas. Na seção 3, apresentam-se os métodos utilizados neste trabalho: o Método Variacional e o Método das Diferenças Finitas. O primeiro é muito utilizado em situações que envolvem o estado fundamental do sistema estudado, enquanto o segundo é amplamente utilizado tanto em equações diferenciais ordinárias quanto em equações diferenciais parciais, baseando-se na aproximação de derivadas por diferenças finitas. Os métodos foram abordados de forma didática e detalhada. Na seção 4, contemplam-se os resultados obtidos por cada método mencionado acima. Na seção 5, encontra-se a discussão dos dados com o intuito de comparar os resultados obtidos pelos métodos aqui citados. E por último, na seção 6, apresentam-se alguns comentários finais e conclusões.

2 Potencial de Pöschl-Teller

O potencial de Pöschl-Teller, nomeado em homenagem aos físicos Herta Pöschl e Edward Teller (PÖSCHL; TELLER, 1933), é um tipo especial de potencial hiperbólico para o qual a ES unidimensional pode ser resolvida em termos de funções especiais.

Figura 1 – Potencial de Pöschl-Teller com amplitude $V_0 = 1,0$



Fonte: Elaboração própria

Esse potencial é descrito matematicamente por

$$V(x) = -V_0 \operatorname{sech}^2(x) \quad (1)$$

onde V_0 é a amplitude/profundidade do potencial, e o termo $\operatorname{sech}(x) = 1/\cosh(x) = 2/(e^x + e^{-x})$ é a secante hiperbólica.

Para determinados casos da amplitude, que serão abordados no decorrer deste trabalho, o potencial de Pöschl-Teller pode apresentar a característica de potencial sem reflexão (LEKNER, 2007), e tais potenciais surgem como soluções solitônicas da equação de Korteweg-de Vries (Equação KdV) (AYCOCK *et al.*, 2017).

3 Metodologia

O objetivo geral deste trabalho é resolver a ES 1D adimensional¹ ($\hbar = m = 1$)

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - V_0 \text{sech}^2(x) \Psi \quad (2)$$

para a qual, através do método de separação de variáveis (GRIFFITHS, 2005) –, ou seja, $\Psi \equiv \Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t)$ –, obtêm-se a ES independente do tempo e a equação diferencial ordinária relacionada ao tempo, respectivamente:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \psi}{dx^2} - V_0 \text{sech}^2(x) \psi = E \psi \quad (3)$$

$$i \frac{d\varphi}{dt} = E \varphi \quad (4)$$

A Eq. (4) é uma equação diferencial ordinária de primeira ordem cuja solução é, a menos de uma constante, a exponencial complexa $\varphi(t) = e^{-iEt}$. Assim, podemos escrever a função de onda como $\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt}$, onde $\psi(x)$ são as soluções estacionárias e E é a energia. Observa-se que resolver a Eq. (3) se torna o principal objetivo deste trabalho. Isto posto, apresentam-se, nas próximas subseções, alguns métodos aqui utilizados para resolver a Eq. (3).

3.1 Método variacional

O Método Variacional (MV) está atrelado na Mecânica Quântica, junto à teoria de perturbação, como alternativa às soluções exatas da Equação de Schrödinger independente do tempo de certos Hamiltonianos. Embora esse método não consiga fornecer todas as autofunções e energias dos autoestados do sistema, muitas vezes a informação

de que realmente precisamos se resume à energia do estado fundamental E_{gs} (*ground state*)². É o princípio variacional que possibilita obter não necessariamente o valor exato, mas um limite superior para E_{gs} , que frequentemente é muito próximo do valor exato (BORGHI, 2018; GRIFFITHS, 2005).

Esse método consiste em escolher uma função de onda teste ψ que dependa de um ou mais parâmetros e determinar os valores desses parâmetros em função da minimização do valor esperado do Hamiltoniano $\langle H \rangle$, ou seja, quando a energia relativa ao $\langle H \rangle$ for a menor possível.

Sendo assim, quanto mais próxima a função de onda teste estiver do que seria a função de onda real, melhor será o resultado obtido (ARAUJO; BORGES; DRIGO FILHO, 2006). A função de onda obtida pela substituição dos parâmetros cujos valores foram determinados pela minimização será uma aproximação da função de onda do estado fundamental, e a energia relativa ao valor esperado do Hamiltoniano neste estado será um majorante para a energia do estado fundamental

$$E_{gs} \leq \langle H \rangle \equiv \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \quad (5)$$

A função de onda teste é conhecida na literatura como *ansatz*, que, em alemão, significa “palpite”. O *ansatz* pode ser qualquer função desde que esta pertença ao chamado espaço de Hilbert (COHEN-TANNOUDJI; DIU; LALOE, 1991). De outro modo, o *ansatz* deve ser quadrado-integrável, garantindo, assim, a normalização da função.

Para calcular o valor esperado de qualquer quantidade Q , calcula-se a integral

$$\langle Q \rangle \equiv \langle \psi | \hat{Q} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{Q} \psi dx \quad (6)$$

onde \hat{Q} é o operador referente ao observável Q . Como todas as variáveis dinâmicas clássicas podem ser expressas em função da posição x e do momento p , podemos obter o operador \hat{Q} através da substituição canônica

$$p \rightarrow -i \hbar \frac{d}{dx} \quad (7)$$

1 É comum, em trabalhos teóricos de Mecânica Quântica, Física Atômica e Molecular, Física de Partículas e de Campos, utilizar equações adimensionais por mera simplificação.

2 Na verdade, desejamos conhecer todo o espectro de energia, mas às vezes é possível determinar apenas a energia do estado fundamental.

Pode-se demonstrar a desigualdade na Eq. (5) expressando, primeiramente, ψ como uma combinação linear das autofunções (desconhecidas) do Hamiltoniano

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n \tag{8}$$

pois estas formam um conjunto completo.

Sendo $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$, ψ normalizada e supondo que as autofunções ψ_n tenham sido ortonormalizadas, ou seja, $\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn}$; segue que

$$\begin{aligned} 1 = \langle \psi | \psi \rangle &= \left\langle \sum_m c_m \psi_m \left| \sum_n c_n \psi_n \right. \right\rangle \\ &= \sum_m \sum_n c_m^* c_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \sum_n |c_n|^2 \end{aligned} \tag{9}$$

Enquanto isso,

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \left\langle \sum_m c_m \psi_m \left| \hat{H} \right| \sum_n c_n \psi_n \right\rangle \\ &= \sum_m \sum_n c_m^* E_n c_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle \\ &= \sum_n E_n |c_n|^2 \end{aligned} \tag{10}$$

Não obstante, a energia do estado fundamental é, por definição, o menor autovalor de H , de modo que $E_{gs} \leq E_n$ e, assim,

$$\langle H \rangle \geq E_{gs} \sum_n |c_n|^2 = E_{gs} \tag{11}$$

Uma vez escolhido o *ansatz* ψ , tal que este dependa de pelo menos um parâmetro variacional \mathbf{b} , deve-se calcular o valor esperado do Hamiltoniano $\langle H \rangle$. Se o sistema for relativamente simples, podemos escrever $\langle H \rangle$ como

$$\langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle \tag{12}$$

onde $\langle T \rangle$ e $\langle V \rangle$ são os valores esperados da energia cinética e da energia potencial, respectivamente.

De acordo com a Eq. (5), esse resultado excede E_{gs} para qualquer parâmetro variacional \mathbf{b} . Sendo assim, para obter o valor deste parâmetro que minimiza $\langle H \rangle$, calcula-se

$$\left. \frac{d\langle H \rangle}{d\mathbf{b}} \right|_{\mathbf{b}_{min}} = 0 \tag{13}$$

Substituindo o parâmetro \mathbf{b}_{min} em $\langle H \rangle$, obtém-se o menor limite superior do valor esperado do Hamiltoniano. Assim determinamos um majorante para E_0 a energia do estado fundamental E_{gs}

$$\langle H \rangle_{min} = E_{min} \equiv E_0 \tag{14}$$

Se porventura E_0 for igual a E_{gs} , então significa que o *ansatz* é exatamente a função de onda do estado fundamental do sistema estudado.

3.2 Método das diferenças finitas

A ideia básica do Método das Diferenças Finitas (MDF) é transformar o problema de resolver uma equação diferencial ordinária ou parcial, linear ou não linear, num problema de resolver um sistema de equações algébricas (RUGGIERO; LOPES, 1996), usando para isso a discretização do domínio da função e a substituição das derivadas presentes na equação diferencial por aproximações envolvendo somente valores numéricos da função, por diferenças finitas.

Em geral, as equações diferenciais a serem resolvidas são Problemas de Valores de Contorno (PVC), sendo que a forma mais geral dos PVCs é dada por

$$\begin{cases} y''(x) = f(x, y(x), y'(x)), a < x < b \\ y(a) = \alpha \\ y(b) = \beta \end{cases} \tag{15}$$

Obtêm-se as fórmulas de aproximações através da série de Taylor da função. Uma série de Taylor é uma expansão em série de potências de uma função $y(x)$ em torno de um ponto $x = \epsilon$, isto é, uma representação de uma função como uma soma infinita de termos que são calculados dos valores das derivadas da função no ponto $x = \epsilon$.

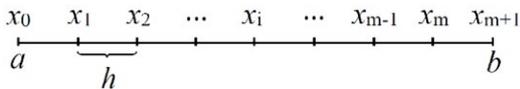
$$y(x) = y(\epsilon) + y'(\epsilon)(x - \epsilon) + \frac{y''(\epsilon)}{2!}(x - \epsilon)^2 + \dots + \frac{y^{(k)}(\epsilon)}{k!}(x - \epsilon)^k + \dots = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{y^{(k)}(\epsilon)}{k!}(x - \epsilon)^k \quad (16)$$

A discretização do domínio ocorre ao dividirmos o intervalo $[a, b]$ em $m+1$ partes iguais de comprimento h , dado por

$$h = \frac{b - a}{m + 1} \quad (17)$$

Dividir o intervalo $m+1$ em partes implica uma discretização de $m+2$ pontos, dos quais denotaremos os extremos do domínio por $x_0=a$ e $x_{m+1}=b$.

Figura 2 – Esquema de discretização do domínio em partes de tamanho



Fonte: Elaboração própria

De acordo com a literatura, o termo h da Eq. (17) é conhecido como passo (*step*) e, quanto menor for o valor do passo, mais precisa será a aproximação, porém, a quantidade de equações também aumenta, influenciando significativamente o tempo de processamento.

Assim, um ponto qualquer do domínio poderá ser representado pela expressão

$$x_i = x_0 + ih, i = 0, 1, \dots, m + 1 \quad (18)$$

e utilizaremos a notação y_i para representar, em algumas equações, o valor da função y calculada no ponto x_i :

$$y_i \rightarrow y(x_i) = y(x_0 + ih), i = 0, 1, \dots, m + 1 \quad (19)$$

A série de Taylor para a função $y(x)$ em torno de um ponto x_i , desprezando os termos de ordem superior a 2, é dada por

$$y(x) = y(x_i) + y'(x_i)(x - x_i) + \frac{y''(x_i)}{2}(x - x_i)^2 \quad (20)$$

Fazendo as substituições $x \rightarrow x_{i+1} = x_i + h$ e $x \rightarrow x_{i-1} = x_i - h$, obtêm-se, respectivamente:

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + y'(x_i)h + \frac{y''(x_i)}{2}h^2 \quad (21)$$

$$y(x_{i-1}) = y(x_i) - y'(x_i)h + \frac{y''(x_i)}{2}h^2 \quad (22)$$

Isolando o termo $y'(x_i)$ nas Eqs. (21) e (22), chega-se em:

$$y'(x_i) = \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} + \mathcal{O}(h) \quad (23)$$

$$y'(x_i) = \frac{y(x_i) - y(x_{i-1})}{h} + \mathcal{O}(h) \quad (24)$$

Em contrapartida, subtraindo a Eq. (21) da Eq. (22) e isolando o termo $y'(x_i)$, obtêm-se

$$y'(x_i) = \frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1})}{2h} + \mathcal{O}(h^2) \quad (25)$$

As Eqs (23), (24) e (25) são as fórmulas de aproximações mais utilizadas para derivadas de primeira ordem no ponto x_i , conhecidas, respectivamente, como diferença avançada, diferença atrasada e diferença centrada.

$$y'(x_i) = \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} \quad (26)$$

$$y'(x_i) = \frac{y(x_i) - y(x_{i-1})}{h} \quad (27)$$

$$y'(x_i) = \frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1})}{2h} \quad (28)$$

Quando aplicamos essas fórmulas, inevitavelmente elas nos levam a erros (RUGGIERO; LOPES, 1996). O erro nas fórmulas da diferença avançada e da diferença atrasada é da ordem $\mathcal{O}(h)$. Já na fórmula da diferença centrada, o erro é da ordem $\mathcal{O}(h^2)$, implicando uma

aproximação mais precisa do que nas outras, uma vez que $h < 1$.

De forma análoga ao que foi desenvolvido até aqui nesta seção, deduziremos, a seguir, a fórmula de aproximação para a derivada de segunda ordem, utilizando novamente a série de Taylor da função $y(x)$ em torno de x_i . Desprezando os termos de ordem superior a 4 e fazendo as substituições $x \rightarrow x_{i+1} = x_i + h$ e $x \rightarrow x_{i-1} = x_i - h$, obtêm-se, respectivamente:

$$y_{i+1} = y_i + y'_i h + \frac{y''_i}{2} h^2 + \frac{y'''_i}{6} h^3 + \frac{y^{(4)}_i}{24} h^4 \quad (29)$$

$$y_{i-1} = y_i - y'_i h + \frac{y''_i}{2} h^2 - \frac{y'''_i}{6} h^3 + \frac{y^{(4)}_i}{24} h^4 \quad (30)$$

Adicionando as Eqs. (29) e (30) e isolando o termo y''_i , obtemos

$$y''(x_i) = \frac{y(x_{i+1}) - 2y(x_i) + y(x_{i-1}))}{h^2} + \mathcal{O}(h^2) \quad (31)$$

Nota-se que o erro obtido é da ordem $\mathcal{O}(h^2)$. Assim, obtemos a fórmula de aproximação para a derivada de segunda ordem no ponto x_i , conhecida, também, por diferença centrada.

$$y''(x_i) \approx \frac{y(x_{i+1}) - 2y(x_i) + y(x_{i-1}))}{h^2} \quad (32)$$

Sendo assim, nosso problema de resolver um PVC como a Eq. (15), sabendo que $a < x < b$, transforma-se em

$$\begin{cases} \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} = f(x_i, y_i, \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}) \\ y(x_0) = \alpha \\ y(x_{m+1}) = \beta \end{cases} \quad (33)$$

3.2.1 Aplicação do MDF na Equação de Schrödinger

Nesta seção, aplicaremos o MDF à ES independente do tempo para um potencial unidimensional $V(x)$. Podemos encarar esta

seção como um tutorial para resolvermos qualquer ES independente do tempo sujeita a potenciais unidimensionais também independentes do tempo, desde que a ES seja linear e unidimensional. Como a ES independente do tempo é um PVC, nossa tarefa se resume em resolver o problema:

$$\begin{cases} -\frac{1}{2} \psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) & a < x < b \\ \psi(a) = \alpha \\ \psi(b) = \beta \end{cases} \quad (34)$$

A Eq. (34) equivale a uma equação de autovalores para o operador Hamiltoniano \hat{H}

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V \quad (35)$$

onde \hat{T} é o operador energia cinética e \hat{V} é o operador energia potencial; ressaltando que, neste artigo, ($\hbar = m = 1$). Os estados estacionários do sistema físico são representados pelas autofunções $\psi(x)$ do operador Hamiltoniano, ou seja, funções que satisfazem

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x) \quad (36)$$

Os autovalores correspondem aos valores de energia do sistema.

Fixado m , o espaçamento h será $(b-a)/(m+1)$ e o intervalo $[a,b]$ será dividido em $x_0 = a, x_1 = x_0 + h, x_2 = x_0 + 2h, \dots, x_i = ih, \dots, x_{m-1} = x_0 + (m-1)h, x_m = x_0 + mh$ e $x_{m+1} = b$, como exibido na Figura 2. Como conhecemos os valores de ψ_n nos extremos do domínio, determinados pelas condições de contorno $\psi(x_0) = \psi(a) = \alpha$ e $\psi(x_{m+1}) = \psi(b) = \beta$, teremos como incógnitas $\psi_n(x_1), \psi_n(x_2), \dots, \psi_n(x_m)$, e assim, para cada $i=1,2,\dots,m$, usaremos a aproximação obtida na Eq. (32)

$$\psi''(x_i) \approx \frac{\psi(x_{i+1}) - 2\psi(x_i) + \psi(x_{i-1}))}{h^2}$$

Para cada i , a Eq. (34) pode ser escrita como

$$-\frac{1}{2} \frac{\psi_n(x_{i+1}) - 2\psi_n(x_i) + \psi_n(x_{i-1}))}{h^2} + V(x_i)\psi_n(x_i) = E_n\psi_n(x_i) \quad (37)$$

ou seja,

$$-\frac{1}{2h^2}\psi_n(x_{i-1}) + \left[\frac{1}{h^2} + V(x_i)\right]\psi_n(x_i) - \frac{1}{2h^2}\psi_n(x_{i+1}) = E_n\psi_n(x_i) \quad (38)$$

Agora, fazendo $i=1$ na Eq. (38), obtemos

$$-\frac{1}{2h^2}\psi_n(x_0) + \left[\frac{1}{h^2} + V(x_1)\right]\psi_n(x_1) - \frac{1}{2h^2}\psi_n(x_2) = E_n\psi_n(x_1) \quad (39)$$

Analogamente, para $i=m$, a Eq. (38) torna-se

$$-\frac{1}{2h^2}\psi_n(x_{m-1}) + \left[\frac{1}{h^2} + V(x_m)\right]\psi_n(x_m) - \frac{1}{2h^2}\psi_n(x_{m+1}) = E_n\psi_n(x_m) \quad (40)$$

O resultado é um sistema linear algébrico de m equações e m incógnitas com solução única (MONERAT *et al.*, 2010):

$$\begin{cases} -\frac{1}{2h^2}\alpha + \left[\frac{1}{h^2} + V(x_1)\right]\psi_n(x_1) - \frac{1}{2h^2}\psi_n(x_2) = E_n\psi_n(x_1) \\ -\frac{1}{2h^2}\psi_n(x_{i-1}) + \left[\frac{1}{h^2} + V(x_i)\right]\psi_n(x_i) - \frac{1}{2h^2}\psi_n(x_{i+1}) = E_n\psi_n(x_i) & 2 \leq i \leq m-1 \\ -\frac{1}{2h^2}\psi_n(x_{m-1}) + \left[\frac{1}{h^2} + V(x_m)\right]\psi_n(x_m) - \frac{1}{2h^2}\beta = E_n\psi_n(x_m) \end{cases} \quad (41)$$

Esse sistema pode ser convenientemente expresso na forma matricial, se escrevermos a função $\psi_n(\mathbf{x})$ como um vetor

$$\psi_n(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_n(x_1) \\ \psi_n(x_2) \\ \vdots \\ \psi_n(x_i) \\ \vdots \\ \psi_n(x_{m-1}) \\ \psi_n(x_m) \end{pmatrix} \quad (42)$$

A partir de tais considerações, o sistema de equações (41) assume a seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} F(x_1) & G & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ G & F(x_2) & G & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & G & F(x_i) & G & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \ddots & \ddots & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & G & F(x_{m-1}) & G \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & G & F(x_m) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_n(x_1) \\ \psi_n(x_2) \\ \vdots \\ \psi_n(x_i) \\ \vdots \\ \psi_n(x_{m-1}) \\ \psi_n(x_m) \end{pmatrix} = E_n \begin{pmatrix} \psi_n(x_1) \\ \psi_n(x_2) \\ \vdots \\ \psi_n(x_i) \\ \vdots \\ \psi_n(x_{m-1}) \\ \psi_n(x_m) \end{pmatrix} \quad (43)$$

onde $F(x_i) = 1/h^2 + V(x_i)$ e $G = -1/(2h^2)$.

Observa-se que a matriz tridiagonal da Eq. (43) de ordem $m \times m$ é simétrica e real; isso significa que podemos diagonalizá-la:

$$\det(\hat{H} - E_n I) = 0 \quad (44)$$

Assim, obtemos o conjunto de autovalores resolvendo o determinante:

$$\begin{vmatrix} F(x_1) - E_n & G & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ G & F(x_2) - E_n & G & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & G & F(x_i) - E_n & G & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \ddots & \ddots & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & G & F(x_{m-1}) - E_n & G \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & G & F(x_m) - E_n \end{vmatrix} = 0 \quad (45)$$

Para obter as autofunções, basta substituir cada autovalor nas Eq. (43) e resolver o sistema linear correspondente.

É importante ressaltar que obter a solução da Eq. (45) utilizando os pacotes computacionais atuais tornou-se uma tarefa relativamente simples, pois, diferente das linguagens compiladas como C++, fortran, entre outras, que são mais complicadas, as linguagens de script como Matlab, Scilab, Octave, Cocalc, R já vêm com uma coleção muito rica de bibliotecas, com numerosos algoritmos, em um ambiente de desenvolvimento agradável.

4 Resultados

4.1 Resultados variacionais

Aplicamos o MV apresentado na seção 3.1 com o intuito de determinar o estado fundamental da ES independente do tempo:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \psi}{dx^2} - V_0 \operatorname{sech}^2(x) \psi = E \psi \quad (46)$$

Soluções variacionais para a equação acima podem ser obtidas ao assumirmos um *ansatz* simétrico na forma gaussiana³:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{b}{\pi}} e^{-bx^2/2} \quad (47)$$

sendo b o parâmetro variacional.

Ao substituirmos a Eq. (47) em $\langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle$, obtêm-se:

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &= -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{b}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-bx^2/2} \frac{d^2}{dx^2} e^{-bx^2/2} dx \\ &= -\frac{b}{2} \sqrt{\frac{b}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} (bx^2 - 1) e^{-bx^2} dx \\ &= \frac{b}{4} \end{aligned} \quad (48)$$

e

³ A função teste gaussiana é bastante usual, mesmo quando tem pouca semelhança com o estado fundamental real, devido à facilidade de se trabalhar com ela.

$$\begin{aligned} \langle V \rangle &= -V_0 \sqrt{\frac{b}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-bx^2/2} \operatorname{sech}^2(x) e^{-bx^2/2} dx \\ &= -V_0 \sqrt{\frac{b}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{sech}^2(x) e^{-bx^2} dx \end{aligned} \quad (49)$$

Isto é,

$$\langle H \rangle = \frac{b}{4} - V_0 \sqrt{\frac{b}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{sech}^2(x) e^{-bx^2} dx \quad (50)$$

Observa-se que a integral relativa ao valor esperado do potencial não possui solução analítica. Fato esse que faz a expressão do valor esperado do Hamiltoniano ficar mais fatigante. Mas, mesmo diante dessa situação, é possível minimizar $\langle H \rangle$ de acordo com a Eq. (13), pois a derivada da minimização é realizada em relação ao parâmetro b e a integral de $\langle V \rangle$ é realizada em relação a x , ou seja, d/db e $\int dx$ comutam entre si.

Diante do exposto, a minimização de $\langle H \rangle$ torna-se

$$\frac{d\langle H \rangle}{db} = \frac{d}{db} \left[\frac{b}{4} - V_0 \sqrt{\frac{b}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{sech}^2(x) e^{-bx^2} dx \right] = 0 \quad (51)$$

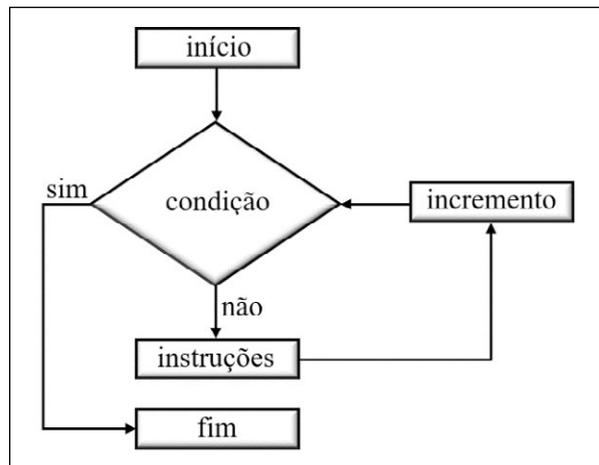
$$\frac{d\langle H \rangle}{db} = \frac{1}{4} - \frac{V_0}{2\sqrt{\pi b}} \int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{sech}^2(x) e^{-bx^2} dx + V_0 \sqrt{\frac{b}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \operatorname{sech}^2(x) e^{-bx^2} dx = 0 \quad (52)$$

Após manipulações algébricas básicas de fatoração e isolando os termos integrais, obtém-se

$$\frac{V_0}{2\sqrt{\pi}} \left[\frac{1}{\sqrt{b}} \int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{sech}^2(x) e^{-bx^2} dx - 2\sqrt{b} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \operatorname{sech}^2(x) e^{-bx^2} dx \right] = \frac{1}{4} \quad (53)$$

A Eq. (53), além de não apresentar solução analítica, é uma equação integral com um grau de complexidade elevado. Todavia, através de um algoritmo de repetição (também chamado de laço ou *loop*) envolvendo comandos do tipo *while*, *for*, etc., a Eq. (53) pode ser resolvida para b desde que o valor da amplitude V_0 seja preestabelecido.

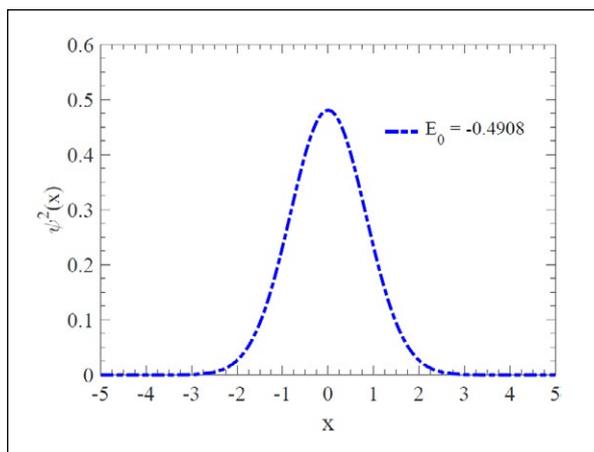
Figura 3 – Fluxograma representativo de um algoritmo de *loop*



Fonte: Elaboração própria

Portanto, para o valor de $V_0 = 1,0$, constatou-se $b = 0,7259$ que, substituído na Eq. (50), resultou em $E_0 = -0,4908$. A função de onda correspondente está plotada na Figura 4.

Figura 4 – Função de onda obtida variacionalmente para o *ansatz* gaussiano $\psi(x) = \sqrt[4]{b/\pi} \exp(-bx^2/2)$. O valor do parâmetro b , obtido através da minimização do Hamiltoniano, foi $b = 0,7259$. Este foi substituído na Eq. (50), obtendo-se $E_0 = -0,4908$



Fonte: Elaboração própria

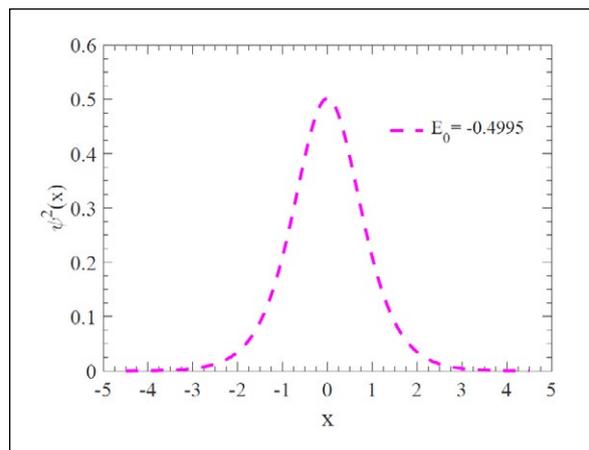
4.2 Resultados numéricos

Aplicamos o Método das Diferenças Finitas apresentado na seção 3.2 com o intuito de resolver a ES independente do tempo

$$-\frac{1}{2}\psi''(x) - V_0 \operatorname{sech}^2(x)\psi = E\psi \quad (54)$$

no intervalo $-4,5 < x < 4,5$, com passo $h = 0,03$ sujeito às condições de contorno de Dirichlet, $\psi(\pm 4,5) = 0$, e amplitude $V_0 = 1,0$. O valor encontrado para energia referente ao estado fundamental foi $E_0 = -0,4908$ e a função de onda correspondente está plotada na Figura 5.

Figura 5 – Função de onda obtida numericamente através do MDF. O valor da energia referente foi $E_0 = -0,4995$



Fonte: Elaboração própria

4.3 Resultados analíticos

Como mencionado na seção 1, o potencial de Pöschl-Teller pertence a uma classe especial de potenciais para os quais a Equação de Schrödinger unidimensional pode ser resolvida em termos de funções especiais. Isto posto, pode-se reescrever o potencial de Pöschl-Teller na forma

$$V(x) = -\frac{l(l+1)}{2} \operatorname{sech}^2(x) \quad (55)$$

em que a amplitude V_0 da Eq. (1) foi substituída pelo termo $l(l+1)/2$ por razões que serão apresentadas a seguir.

Assim, a Equação de Schrödinger independente do tempo se torna

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{l(l+1)}{2} \operatorname{sech}^2(x)\psi = E\psi \quad (56)$$

cujas soluções podem ser encontradas em virtude da substituição $u = \tanh(x)$. Sendo assim, segue que a derivada primeira se transforma em

$$\frac{d\psi}{dx} = (1-u^2) \frac{d\psi}{du} \quad (57)$$

e a derivada segunda se torna

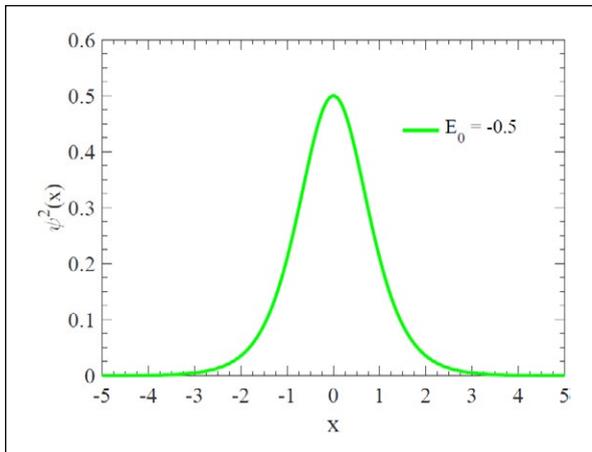
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = (1 - u^2)^2 \frac{d^2\psi}{du^2} - 2u(1 - u^2) \frac{d\psi}{du} \quad (58)$$

Assim, após algumas manipulações algébricas simples, a Eq. (56) se transforma em

$$(1 - u^2) \frac{d^2\psi}{du^2} - 2u \frac{d\psi}{du} + \left[l(l + 1) + \frac{2E}{1 - u^2} \right] \psi = 0 \quad (59)$$

que é a Equação de Legendre Associada (motivo pelo qual utilizou-se a substituição da amplitude V_0 pelo termo $l(l + 1)/2$), cuja solução são os Polinômios Associados de Legendre, $P_l^m(u)$, com $E = -m^2/2$, $l = 1, 2, 3, \dots$ e $m = 1, 2, \dots, l - 1, l$. O estudo da Equação de Legendre Associada bem como sua solução já estão bem estabelecidos na literatura (ARFKEN; WEBER, 2007; BOYCE; DIPRIMA, 1992; BUTKOV, 1978). No entanto, as funções de ondas devem ser normalizadas à unidade, acarretando alterações dos valores multiplicativos dos P_l^m . Observa-se também que o caso $l = 0$ não é considerado, pois, caso fosse, o potencial seria nulo. O caso analisado na seção 4.1 e na seção 4.2 foi para $V_0 = 1$, que é equivalente a $l = 1$ e, conseqüentemente, a $m = 0$.

Figura 6 – Função de onda obtida analiticamente, sendo esta o polinômio associado de Legendre $P_1^1(\tanh(x))$. A energia referente à autofunção foi $E_0 = -0,5$



Fonte: Elaboração própria

Sendo assim, o polinômio que buscamos é $P_1^1(u) = (1 - u)^{1/2}$, onde $u = \tanh(x)$, ou seja,

$$\psi(x) \rightarrow P_1^1(\tanh(x)) = (1 - \tanh^2(x))^{1/2} = \text{sech}(x) \quad (60)$$

que, após normalização, fica

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{sech}(x) \quad (61)$$

e a energia fica

$$E_0 \rightarrow E = -\frac{m^2}{2} = -\frac{1}{2} \quad (62)$$

5 Discussão dos resultados

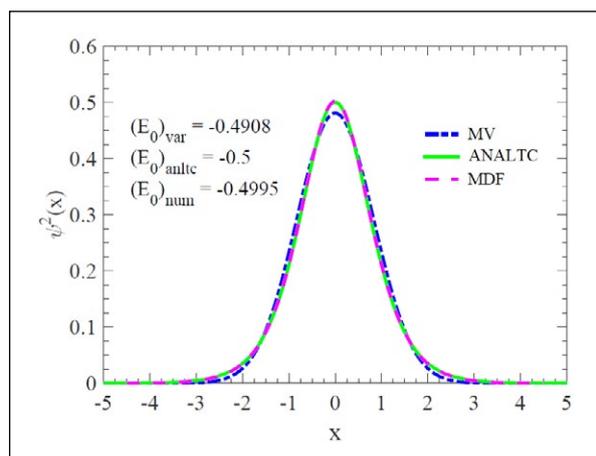
Constatamos que o Método das Diferenças Finitas, em virtude de sua simplicidade e vasta aplicabilidade, é ideal para a quantização de Hamiltonianos cujas soluções analíticas sejam desconhecidas. Enfatizamos também, como pode ser visto na Figura 7, a precisão do método, o que o torna uma ferramenta imprescindível não somente para os discentes de graduação em Física, mas também para pós-graduandos.

Entretanto, é de extrema importância ressaltar algumas ponderações acerca das condições de contorno empregadas na ES estacionária através do MDF. Sabemos que soluções da ES sujeita a potenciais do tipo poço apresentam estados ligados descritos por um espectro discreto de energia. Como é bem sabido, os estados relevantes do espectro discreto são selecionados pelas condições de contorno de tal forma que a função de onda se anule para $x \rightarrow \pm \infty$ (em 1D). Se considerarmos um poço razoavelmente profundo, as condições de contorno de Dirichlet – por mais que afetem os autovalores, ainda que de forma irrelevante – descrevem o limite para $x \rightarrow \pm \infty$. Entretanto, se considerarmos um poço relativamente raso, a energia de ligação do estado fundamental, como foi tratada neste artigo, tornar-se-á insuficiente para que as condições de Dirichlet sejam empregadas – a menos que o intervalo utilizado na discretização aumente relativamente bastante, pois o decaimento da função de onda fora do potencial se torna muito lento. Isso acarretará o aumento do tempo de processamento das contas, caso o passo (*step*) utilizado na discretização não seja aumentado. É interessante que uma solução para esse problema poderia ser obtida através da discretização não linear do intervalo, como

encontrado em outras teorias, por exemplo, Grupo de Renormalização Numérica (YOSHIDA; WHITAKER; OLIVEIRA, 1990). Isso será objeto de pesquisa em um futuro artigo.

Com relação ao Método Variacional, percebemos que ele é extraordinariamente poderoso e fácil de ser usado, pois, mesmo que o *ansatz* tenha pouca semelhança com a função de onda real, o valor da energia obtido pelo valor esperado do Hamiltoniano será muito próximo do valor exato da energia do estado fundamental. O único problema com esse método é que não há uma certeza do quão próximo se está de E_{gs} ; a única garantia é a de ter um limite superior.

Figura 7 – Comparação entre as autofunções relativas ao estado fundamental obtidas pelo MV (azul) e pelo MDF (magenta) e a autofunção analítica (verde). Com relação à energia do estado fundamental, o erro relativo percentual do valor obtido numericamente em relação ao valor exato foi de 0,01%, enquanto o erro relativo percentual obtido variacionalmente em relação ao valor exato foi de 1,84%



Fonte: Elaboração própria

6 Conclusão

Neste trabalho, observamos que tanto a solução variacional quanto a solução numérica para a Equação de Schrödinger 1D independente do tempo submetida ao potencial de Pöschl-Teller se mostraram muito precisas em relação ao resultado analítico exato.

Dessa forma, além de granjear o conhecimento sobre esse potencial pouco explorado em livros de Mecânica Quântica da graduação, o discente terá a competência de empregar os métodos aqui explorados na busca de soluções para outros potenciais pouco

investigados que não apresentam soluções analíticas exatas. Como estímulo para futuros trabalhos, sugerimos o estudo do potencial de Eckart (COSTA *et al.*, 2016).

Reafirmamos, aqui, a importância do estudo dos métodos variacionais e numéricos para a busca de soluções da Equação de Schrödinger em determinados sistemas quânticos e ressaltamos que o potencial abordado neste texto é amplamente estudado em profusos trabalhos, havendo diversos textos na literatura que tratam de tal potencial, como foi citado na seção 1.

Em vista disso, apresentamos, de forma didática, a aplicação de cada método da forma mais detalhada possível. Esperamos, assim, ter proporcionado ao leitor o incentivo necessário para continuar o estudo desse potencial e dos métodos aqui contemplados.

REFERÊNCIAS

- ALMEIDA, M. M.; GUIMARÃES, M. N.; PRUDENTE, F. V. Sobre o confinamento espacial de sistemas quânticos: o oscilador harmônico unidimensional e o átomo de hidrogênio. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 27, n. 3, p. 395-405, 2005.
- ARAUJO, J. C. B.; BORGES, G. R. P.; DRIGO FILHO, E. Supersimetria, método variacional e potencial de Lennard-Jones (12,6). **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 28, n. 1, p. 41-44, 2006.
- ARFKEN, G. B.; WEBER, H. J. **Física matemática: métodos matemáticos para Engenharia e Física**. Rio de Janeiro: Elsevier, 2007.
- ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. **Solid State Physics**. New York: HRW International Editions, 1976.
- ASSI, I. A.; IKOT, A. N.; CHUKWUOCHA, E. O. Solutions of the D-Dimensional Schrödinger equation with the hyperbolic Pöschl-Teller potential plus modified ring-shaped term. **Advances in High Energy Physics**, v. 2018, n. 4, p. 1-15, 2018.
- AYCOCK, L. M.; HURST, H. M.; EFIMKIN, D. K.; GENKINA, D.; LU, H.; GALITSKI, V. M.; SPIELMAN, I. B. Brownian motion of solitons in a Bose-Einstein condensate. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 114, n. 10, p. 2503-2508, 2017.
- BAZEIA, D.; FERREIRA, D. A.; LIMA, E. E. M.; LOSANO, L. Novel results for kinklike structures

and their connections to quantum mechanics. **Annals of Physics**, v. 395, p. 275-300, 2018.

BORDAG, M. Conditions for Bose-Einstein condensation in periodic background. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, v. 53, n. 1, p. 015003, 2019.

BORGHI, R. The variational method in quantum mechanics: an elementary introduction. **European Journal of Physics**, v. 39, n. 3, p. 035410, 2018.

BOYCE, W. E.; DIPRIMA, R. C. **Elementary differential equations and boundary value problems**. New York: John Wiley, 1992.

BRAGA, C. L. R. **Notas de Física Matemática**. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2006.

BUTKOV, E. **Física Matemática**. Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 1978.

COHEN-TANNOUJDI, C.; DIU, B.; LALOE, F. **Quantum Mechanics**. New York: Wiley, 1991. v. 1.

CONTRERAS-ASTORGA, A.; CABRERA, D. J. F. First-Order SUSY Partners of the Trigonometric Pöschl-Teller Potential. **AIP Conference Proceedings**, v. 960, p. 55-60, 2007.

COSTA, E. D'M.; CORDEIRO, L.; LEMES, N. H. T.; BRAGA, J. P. Coeficientes de transmissão e reflexão pelo método da amplitude variável. **Química Nova**, v. 39, n. 7, p. 882-885, 2016.

DURMUS, A. Spectra generated by a non-central generalized Kratzer potential and explicit expressions for expectation values of r^s in N -dimensions. **European Journal of Physics**, v. 36, n. 5, p. 055050, 2015.

EISBERG, R. M.; RESNICK R. **Física quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas**. Rio de Janeiro: Editora Campus, 1983.

GASANOV, Kh. A.; GUSEINOV, J. I.; ABBASOV I. I.; ASKEROV, D. J.; SADIG, Kh. O. Electron-Phonon Scattering in Quantum-Sized Films with the Hyperbolic Pöschl-Teller Potential. **Ukrainian Journal of Physics**, v. 64, n. 4, p. 336-339, 2019.

GRIFFITHS, D. J. **Introduction to Quantum Mechanics**. New Jersey: Pearson Prentice Hall, 2005.

HAMMOU, A. A. B.; CHABAB, M.; EL BATOUL, A.; HAMZAVI, M.; LAHBAS, A.; MOUMENE, I.; OULNE,

M. Bohr Hamiltonian with trigonometric Pöschl-Teller potential in -unstable and -stable pictures. **The European Physical Journal Plus**, v. 134, p. 577, 2019.

HARTMANN, R. R.; PORTNOI, M. E. Two-dimensional Dirac particles in a Pöschl-Teller waveguide. **Scientific Reports**, v. 7, p. 11599, 2017.

KITTEL, C. **Introduction to Solid State Physics**. New York: Wiley, 1976.

LEKNER, J. Reflectionless eigenstates of the sech^2 potential. **American Journal of Physics**, v. 75, n. 12, p.1151-1157, 2007.

MONERAT, G. A.; FERREIRA FILHO, L. G.; CORRÊA SILVA, E. V.; OLIVEIRA-NETO, G.; NOGUEIRA, P. H. A. S.; ASSUMPÇÃO, A. R. P. Quantização de sistemas hamiltonianos via método de diferenças finitas. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 32, n. 1, p. 1304, 2010.

PIMENTEL, D. R. M.; CASTRO A. S. O oscilador harmônico singular revisitado. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 35, n. 3, p. 1-8, 2013.

PIMENTEL, D. R. M.; CASTRO, A. S. Uma breve discussão sobre os possíveis estados ligados para uma classe de potenciais singulares. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 36, n. 1, p. 1-8, 2014.

PÖSCHL, G.; TELLER, E. Bemerkungen zur Quantenmechanik des anharmonischen Oszillators. **Zeitschrift für Physik**, v. 83, p. 143-151, 1933.

PRATIWI, B. N.; SUPARMI, A.; CARI, C.; HUSEIN, A. S. Asymptotic iteration method for the modified Pöschl-Teller potential and trigonometric Scarf II non-central potential in the Dirac equation spin symmetry. **Pramana**, v. 88, p. 25, 2017.

RUGGIERO, M. A. G.; LOPES, V. L. R. **Cálculo numérico: aspectos teóricos e computacionais**. São Paulo: Makron Books do Brasil, 1996.

SARATH, R.; VINODKUMAR, P. C. Bose-Einstein condensation in generalized Pöschl-Teller potential. **Pramana**, v. 85, p. 77-89, 2015.

SUMARYADA, T.; PUTRA, B. M.; PRAMUDITO, S. Quantum anharmonic oscillator plus delta-function potential: a molecular view of pairing formation and breaking in the coordinate space. **European Journal of Physics**, v. 38, n. 3, p. 035401, 2017.

YOSHIDA, M.; WHITAKER, M. A.; OLIVEIRA, L. N. Renormalization-group calculation of excitation properties for impurity models. **Physical Review B**, v. 41, n. 13, p. 9403-9414, 1990.