

Análise Numérica da Equação de Schrödinger com potenciais do tipo Morse e aplicações em Sistemas Moleculares

Vinícius G. Dias¹; Diego F. S. V. San'Ana²
CCT/UFCA, Juazeiro do Norte, CE

O desenvolvimento de leis para descrever o comportamento de partículas microscópicas veio a partir de observações experimentais diretas. Na mecânica clássica, a descrição de movimentos macroscópicos são regidos pelas leis de Newton. No entanto, em escalas à nível microscópico, vemos que os comportamentos mudam drasticamente de modo que as leis fundamentais da mecânica clássica precisam ser reformuladas. Para alguns movimentos ondulatórios clássicos, os postulados de De Broglie e Planck são suficientes para descrever os comportamentos de partículas somente para casos específicos. Porém, a descrição geral de um sistemas físico à nível microscópico, onde se fundamenta a mecânica quântica é feita pela **equação de Schrödinger**. [2].

A equação de Schrödinger é uma **equação diferencial parcial** (EDP) que depende tanto do tempo quando da posição da partícula. Quando utilizada para se descrever sistemas físicos em um regime de modelo mais realístico, torna-se de difícil solução analítica. A complexidade inerente à resolução analítica surge de vários fatores como condições de contorno necessárias, sistemas com mais de uma partícula gerando uma EDP de multiplas variáveis de difícil solução. Neste trabalho, nos restringiremos à equação de Schrödinger unidimensional e em regime estacionário:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \right) + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (1)$$

onde \hbar é a constante de planck reduzida, m é a massa da partícula associada, ψ é a função de onda, V é a função potencial e E é a energia da partícula.

Devido a essas dificuldades, **métodos numéricos** tornam-se ferramentas indispensáveis para encontrar soluções aproximadas [3]. Estes métodos permitem o tratamento computacional de sistemas quânticos complexos, oferecendo soluções numéricas que podem prever resultados experimentais com uma **significativa precisão**.

A utilização do **potencial de Morse** [1] na equação de Schrödinger representa uma aproximação significativa para descrever sistemas moleculares de forma mais realista. O potencial de Morse **difere do potencial do oscilador harmônico**, pois leva em consideração a **anarmonicidade das ligações moleculares**, que se torna mais evidente à medida que a separação interatômica aumenta. Na equação de Schrödinger, o potencial de Morse é expresso como:

$$V(x) = De \left(1 - e^{-a(x-x_e)} \right)^2 \quad (2)$$

Este potencial é mais adequado para descrever o comportamento vibracional de moléculas diatômicas, pois ele prevê corretamente a dissociação da molécula em átomos separados quando a energia é suficiente para superar a profundidade do poço de potencial (De).

¹vinicius.goncalves@aluno.ufca.edu.br

²diego.veras@ufca.edu.br

Com isso, o objetivo desta pesquisa é analisar através de métodos matemáticos computacionais aplicados à equação de Schrödinger o comportamento das funções de onda, bem como dos níveis de energia, a partir de sistemas moleculares, aproximando o modelo às medidas experimentais conhecidas da literatura e entendendo seu comportamento.

Para o desenvolvimento da pesquisa, este estudo emprega o **método das diferenças finitas**, implementado em Python, para resolver a equação de Schrödinger e investigar as propriedades vibracionais das moléculas. A metodologia envolve a discretização do espaço, a formulação do problema com condições de contorno apropriadas e a aplicação do potencial de Morse, que captura a anarmonicidade das ligações moleculares. Os resultados numéricos são analisados e comparados com soluções analíticas ou dados experimentais para validar o modelo.

Com a análise numérica da equação de Schrödinger para um potencial do tipo Morse, somos capazes de modelar ligações químicas em moléculas diatômicas. Os níveis de energia advém dos autovalores E , além de que, as funções de onda fornecem as propriedades vibracionais da molécula. De posse do conjunto de autovalores e autovetores, podemos estimar a energia de dissociação da molécula de gás de Hidrogênio (H_2), por exemplo.

Referências

- [1] Chemicool Dictionary. **Definition of Morse Potential**. Online. Acessado em 10/02/2024, https://www.chemicool.com/definition/morse_potential.html.
- [2] R. Einsberg e R. Resnick. **Física quântica : átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas**. 23a. tiragem. São Paulo: Campus, 1979. ISBN: 9788570013095.
- [3] E. Fontana. “Método de Diferenças Finitas para EDP’s Parabólicas”. Em: **Introdução ao Método de Diferenças Finitas com Aplicações em Engenharia Química**. 2019. Cap. 6, pp. 70–78.