

Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”  
Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas  
Campus de São José do Rio Preto

# **Solução Analítica da Equação de Movimento Clássica para o Potencial de Morse Generalizado e Potenciais de Morse Simétricos**

Flavio Luiz de Moraes Barboza

Dissertação apresentada para obtenção do título de  
Mestre em Biofísica Molecular, área de concentração em  
Biofísica Molecular do Instituto de Biociências, Letras  
e Ciências Exatas (IBILCE) da Universidade Estadual  
Paulista “Júlio de Mesquita Filho” – UNESP.

Orientador: Prof. Dr. Elso Drigo Filho

São José do Rio Preto - SP

2007

Dedicado a todos meus amigos.

# Agradecimentos

Agradeço imensamente a todos que colaboraram de alguma forma com o desenvolvimento deste trabalho; aos meus grandes amigos de faculdade dos quais captei bastante conhecimento; aos meus pais, José Luiz e Elina, que me ensinaram a ver o mundo de várias formas e saber usufruir do seu lado bom da melhor maneira possível; aos meus irmãos, Junior e Leo, que estiveram comigo em momentos inesquecíveis da minha infância e juventude; a minha namorada Ana Cláudia que me suportou durante boa parte deste trabalho e que me incentivou de forma única; ao meu cunhado Cláudio e sua família pelos churrascos de sexta à noite; a minha cunhada Edna pelo apoio e exemplo de dedicação; ao instituto por conceder momentos tão felizes dos quais pude participar (como o Intercursos); a todos professores que algum dia puderam dedicar um pouco de seu conhecimento para me ensinar, não só o conhecimento mas também a me transformar em um homem; aos meus companheiros de trabalho que tanto se dedicam pelo futuro da educação; aos meus alunos que me ensinam uma infinidade de formas de ser, ver e viver; aos amigos que conheci nos últimos tempos em Penápolis, que me propiciaram momentos de alegria e diversão; aos membros desta banca que me deram a honra de tê-los como críticos do meu trabalho; ao meu grande amigo Elso que foi além de um mero orientador.

Não posso deixar de agradecer a Secretaria do Estado da Educação do Estado de São Paulo, ao CNPq, à Pró-Reitoria da UNESP pelos respectivos apoios financeiros em prol deste trabalho. Agradeço também ao pessoal do XXX-ENFMC(Encontro de Física da Matéria Condensada) onde pude apresentar o início do meu trabalho, e do ICBP-2007 (International Conference of Biological Physics) onde tive o primeiro contato internacional com a pesquisa.

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>iii</b>
<b>Resumo</b>	<b>1</b>
<b>Abstract</b>	<b>2</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>3</b>
<b>2 Formulação Newtoniana: o movimento de uma partícula</b>	<b>7</b>
2.1 Princípio da Inércia . . . . .	7
2.2 Princípio Fundamental da Dinâmica . . . . .	8
2.3 Princípio da Ação e Reação . . . . .	9
2.4 Comentários sobre as leis de Newton . . . . .	11
2.5 Trabalho e Energia de uma partícula . . . . .	12
2.6 Equilíbrio . . . . .	13
2.7 Espaço de Fase . . . . .	15
<b>3 Solução da Equação de Movimento</b>	<b>16</b>

3.1	Caso em que $\alpha = 0$ : Potencial de Morse . . . . .	18
3.2	Caso em que $b = 0$ . . . . .	19
3.3	Caso em que $b = -a$ . . . . .	24
3.4	Caso em que $b = -2a$ . . . . .	26
3.5	Solução para o Potencial de Morse Simétrico . . . . .	27
3.5.1	Soluções do Potencial de Morse Simétrico à Esquerda $V_{Ml}$ . . . . .	29
3.5.2	Soluções encontradas para o potencial de Morse simétrico à direita $V_{Mr}$ . . . . .	31
<b>4</b>	<b>Espaços de Fases das soluções encontradas</b>	<b>33</b>
<b>5</b>	<b>Conclusão</b>	<b>40</b>
	<b>Apêndice A</b>	<b>42</b>
	<b>Apêndice B</b>	<b>50</b>
	<b>Apêndice C</b>	<b>55</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>62</b>

# Lista de Figuras

1.1	Gráfico de potenciais gerados pelo Potencial de Morse Generalizado . . . . .	5
2.1	Representação do Princípio da Inércia . . . . .	8
2.2	Terceira Lei de Newton: visualização . . . . .	10
2.3	Exemplo de Estudo de Equilíbrio . . . . .	14
2.4	Espaço de Fase de uma partícula sujeita ao Potencial de Morse . . . . .	15
3.1	Potencial de Morse Generalizado quando $b = 0$ . . . . .	20
3.2	Potencial de Morse Generalizado em um caso onde não existe poço . . . . .	25
3.3	Potencial de Morse Generalizado: exemplo de potencial sem barreira . . . . .	26
3.4	Potenciais de Morse Simétricos à esquerda e à direita . . . . .	28
4.1	Espaço de Fase no caso em que $b = 0$ . . . . .	34
4.2	Espaço de Fase no caso em que $b = -a$ . . . . .	35
4.3	Espaço de Fase no caso em que $b = -2a$ . . . . .	36
4.4	Espaço de Fase no caso em que $b = -a$ : Caso Particular . . . . .	37
4.5	Espaço de Fase do Potencial Simétrico à Esquerda . . . . .	38
4.6	Espaço de Fase do Potencial Vmr . . . . .	39

# Resumo

Neste trabalho são apresentadas as soluções da equação de movimento clássica para uma partícula sujeita ao potencial de Morse Generalizado. Nesse potencial, utilizando parâmetros adequados recupera-se o potencial de Morse na sua forma conhecida. Essa mesma resolução também foi feita para potenciais simétricos de Morse. Este estudo foi realizado pensando no modelo mecânico do Ácido Desoxirribonucléico (DNA), mais especificamente, na simulação das pontes de hidrogênio entre os pares de base. As equações de movimento são tratadas como clássicas, pois algumas propriedades do DNA permitem a essa molécula um tratamento deste tipo. Manipulando-se classicamente, a resolução da equação de movimento é bastante simples e, através de técnicas de integração, encontra-se uma solução exata para o potencial em questão. Poucos trabalhos são vistos na literatura com o potencial de Morse num estudo clássico, o que foi mais um incentivo para o desenvolvimento desse resultado.

# Abstract

This study presents the solutions of classical motion equation for a particle subject to a Generalized Morse Potential. With this potential are using appropriate parameters one can recover the Morse potential as it is usually known. The same work had been done for symmetric Morse potentials. The main motivation for this work are the mechanical models for Deoxiribonucleic Acid (DNA), more specifically, the H-bonds simulation between base pairs. The motion equations are discussed in a classical level, because some DNA properties allow these treatment. In Classical way, the resolution of motion equation is very simpler. Applying integration techniques meets an exact solution when the Morse Potential is employed in this equation. There are few Classical Morse Potential studies founded in the literature. Due to this fact, it was an impulse to develop this result.

# Capítulo 1

## Introdução

Em 1929, Philip McCord Morse divulgou seu trabalho sobre o comportamento de moléculas diatômicas [1], onde foram apresentados resultados sobre modos de vibração, dinâmica molecular e quantidade de energia para esses sistemas. Nesse estudo, Morse utilizou um potencial do tipo não-linear, com a capacidade de simular um sistema não-confinante. Esse novo potencial pode substituir o potencial harmônico no estudo de oscilações com resultados satisfatórios quando comparados com aqueles obtidos experimentalmente.

Analisando as moléculas diatômicas, Morse percebeu que um potencial escrito em termos de exponenciais poderia descrever bem as propriedades vibracionais e a dissociação da molécula. Daí em diante, o potencial de Morse foi amplamente utilizado para descrever aspectos físicos para vários sistemas, particularmente do ponto de vista quântico (vide, como exemplo, [2, 3]).

Em Mecânica Clássica o uso do Potencial de Morse permaneceu bastante restrito. São poucos os trabalhos encontrados na literatura onde o potencial de Morse é discutido para sistemas clássicos. Vale a pena ressaltar o trabalho de DeMarcus [4], que determina uma solução para a equação de movimento clássica usando esse potencial. Entretanto, esse trabalho deixa obscuras as constantes relacionadas com as condições iniciais do problema. Como ferramenta importante deste trabalho, em anexo é apresentada uma reprodução do artigo (em processo de publicação) que descreve passo a passo a técnica utilizada para a

solução da equação de movimento no caso clássico.

Mais recentemente, foi impulsionado o interesse em manipular o potencial de Morse na forma clássica. Nos últimos anos, ele tem assumido papel importante na construção de modelos teóricos para a molécula de Ácido Desoxirribonucléico (DNA). Nesse contexto, o potencial de Morse é utilizado para estudar a energia das ligações de hidrogênio[5, 6]. Seu estudo é feito classicamente devido ao comprimento de onda associado à distância entre os nucleotídeos, cuja medida é da ordem de décimos de ângstrons, ser bem menor em relação ao tamanho dos nucleotídeos, que tem seu tamanho na ordem de unidade de ângstrons. Assim, não se faz necessário um tratamento quântico do problema.

O estudo sobre a molécula de DNA tem sido realizado por pesquisadores de diferentes áreas. A complexidade do sistema representado por esta molécula deixa em aberto diversos aspectos: classes de ligações, formas estruturais de seus componentes e suas propriedades, manipulação e armazenamento de informações, captação de energia para a realização de vários processos, entre outros[7]. Com o objetivo de tratar os problemas com mais facilidade, tem sido utilizado modelos que simplificam o tratamento dessa macromolécula. Esses modelos têm permitido encontrar resultados bem expressivos experimentalmente.

Nestes estudos do DNA, a Física tem colaborado no sentido de trabalhar com vários tipos de problemas: estrutura, dinâmica, comportamento, entre outros [5]. Várias conclusões importantes foram obtidas através de técnicas como: raio-X [8], fluorescência [9], infravermelho [10], ressonância magnética nuclear (NMR) [11], dentre outras [12]. Descrições teóricas foram propostas para simular o DNA, como é o caso do modelo mecânico proposto por Peyrard e Bishop [13] no final da década de 1980. Neste modelo, a descrição das pontes de hidrogênio entre os pares de base que compõem o DNA é feita usando o potencial de Morse unidimensional.

Com o propósito de alargar as possibilidades de descrição das pontes de hidrogênio no modelo físico do DNA, este trabalho estuda um potencial mais geral, chamado de Potencial de Morse Generalizado, obtido a partir de algumas modificações sobre o potencial de Morse, utilizado inicialmente por Peyrard e Bishop [5]. Este potencial tem solução analítica,

permitindo uma análise ampla dos resultados.

O potencial de Morse Generalizado unidimensional estudado é definido por

$$U(x) = D(e^{-ax} - 1)^2 + \alpha D e^{bx} - D \quad (1.1)$$

onde  $\alpha$  é um número real e  $b$  é um parâmetro proporcional ao valor de  $a$ . É importante comentar que o parâmetro  $b$  deve sempre ter valores negativos para que o potencial em questão tenha características semelhantes ao potencial de Morse, caso contrário o potencial tende a  $+\infty$  quando  $x \rightarrow +\infty$ .

Estas condições permitem que haja solução analítica para a equação de movimento. O gráfico mostrado na figura 1.1 mostra várias formas assumidas pelo potencial generalizado para diferentes valores dos parâmetros. Para a construção das curvas utilizaram-se os mesmos valores para  $a$  e  $D$ , sendo ambos iguais a um e diferentes valores de  $b$  e  $\alpha$ .

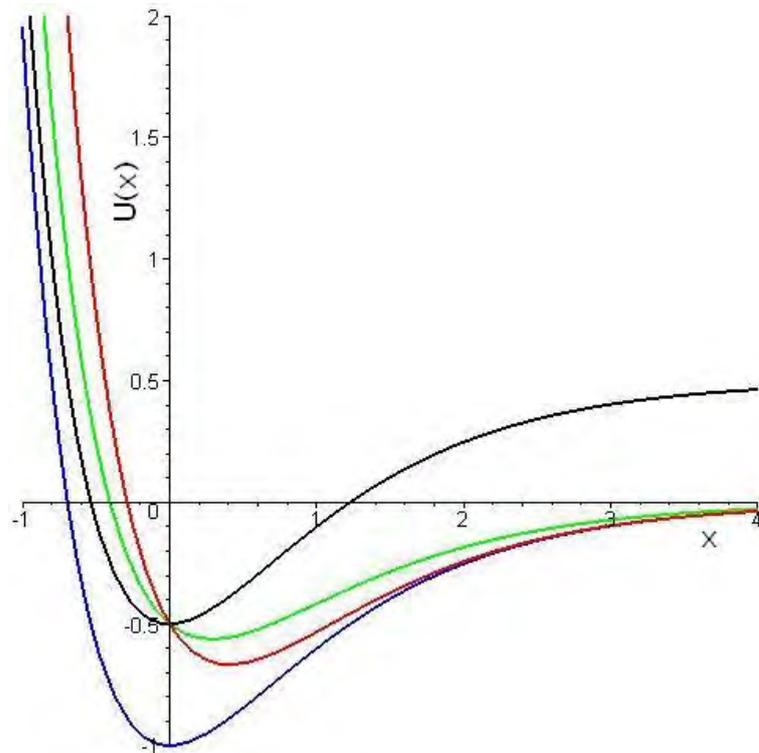


Figura 1.1: Forma dos diferentes tipos de potenciais gerados pelo Potencial de Morse Generalizado. A curva Azul representa o potencial de Morse ( $\alpha = 0$ ). A curva preta tem como parâmetros  $\alpha = 0.5$  e  $b = 0$ . Na curva verde os parâmetros adotados foram  $\alpha = 0.5$  e  $b = -a$ . Para a curva vermelha,  $\alpha = 0.5$  e  $b = -2a$ . Para todos os casos foi adotado  $D = a = 1$ .

Observando a forma do potencial generalizado (figura 1.1) é interessante comentar que quando  $\alpha = 0$  é recuperado o potencial de Morse, cuja solução é conhecida. Isso justifica o uso do nome “Generalizado”, adequando-se melhor a definição do potencial em questão.

Os gráficos que representam estes potenciais possuem formas semelhantes, no que diz respeito à formação de um poço, característico do potencial de Morse. Este poço é denotado como a região do gráfico onde a energia potencial  $U(x)$  tem um mesmo valor para dois valores distintos de  $x$ . No entanto, devido aos valores de  $b$  e  $\alpha$  serem fatores determinantes na construção da curva, elas diferenciam-se em relação a seu ponto de mínimo (fundo do poço), profundidade(D) e largura(associada ao valor de  $a$ ).

As soluções foram separadas em três blocos: quando  $b$  assume os valores  $0$ ,  $-a$  e  $-2a$ . Este estudo deve ser feito separadamente já que o termo exponencial agregado muda seu expoente e a equação a ser solucionada sofre uma variação em seus coeficientes. Em cada um desses casos  $\alpha$  será incorporado em um coeficiente diferente do polinômio a ser estudado.

Além do Potencial de Morse Generalizado, é realizado um estudo nos casos de potenciais simétricos do potencial de Morse, já que o método para solucionar a equação de movimento usando este potencial é bem semelhante àquele utilizado na forma generalizada. Um desses potenciais simétricos forma um potencial confinante, o que pode ser um caso interessante na descrição de sistemas de partículas que estão sempre presas dentro do poço.

Como complemento deste trabalho apresenta-se em apêndices três tópicos correlacionados ao assunto desta dissertação. Como o potencial de Morse é bastante usado em Mecânica Quântica, no apêndice A é apresentada uma solução para a equação de onda de Schrödinger usando o potencial de Morse, via transformada de Laplace. No apêndice B é feito a resolução em detalhes da equação de movimento clássica usando o potencial de Morse. E o apêndice C apresenta algumas experiências baseadas nos conceitos de energia feitas com alunos de Ensino Médio.

# Capítulo 2

## Formulação Newtoniana: o movimento de uma partícula

O movimento estudado nesse trabalho é descrito pelo tratamento clássico, ou seja, as soluções da equação de movimento são encontradas a partir das Leis de Newton. Nesse sentido, este capítulo dedica-se a definição dos conceitos envolvidos e apresenta as notações básicas da Mecânica Clássica [14, 15, 16, 17, 18].

### 2.1 Princípio da Inércia

Conhecido como a *Primeira Lei de Newton*, a qual define o estado de uma partícula [14]:

*“Uma partícula permanece no seu estado de repouso (se já estiver em repouso) ou em movimento (caso encontre-se em movimento) a menos que a ação de uma força sobre ela obrigue-a a mudar seu estado”.*

Ao introduzir esta lei, Newton definiu dois conceitos extremamente importantes: a quantidade de matéria que compõe uma partícula, chamada de *massa*, e a quantidade de seu movimento, denotado *momento linear*. Este segundo conceito é definido como uma

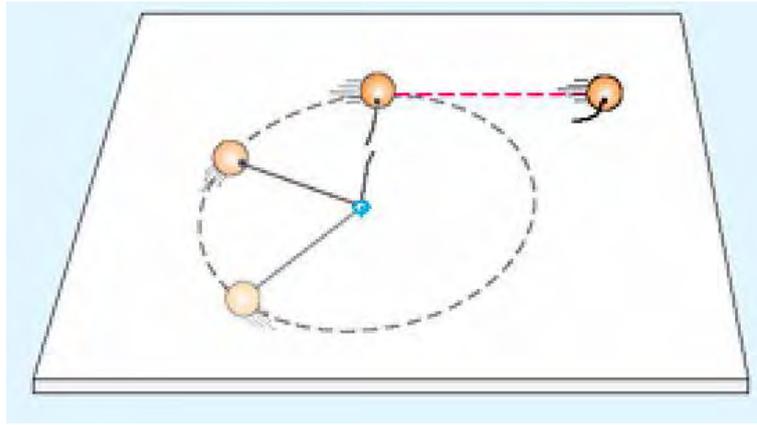


Figura 2.1: Representação do Princípio da Inércia: após o corpo ficar livre da ação da força centrípeta sua tendência é permanecer em movimento retilíneo constante.

quantidade proporcional a velocidade desse objeto e a uma constante de proporcionalidade que, neste caso, é a sua própria massa. Equacionando esta definição, a grandeza momento  $p$  em função da velocidade da partícula  $v$  e sua respectiva massa  $m$  é dada por

$$\mathbf{p} = m \cdot \mathbf{v}. \quad (2.1)$$

## 2.2 Princípio Fundamental da Dinâmica

O Princípio Fundamental da Dinâmica, que é a *Segunda Lei de Newton*, é uma lei básica que estuda o comportamento de um sistema em contextos macroscópicos. Para mostrá-la, é necessário denotar uma grandeza que está associada diretamente com a dinâmica dos corpos, a força. Em [15] vê-se que“(...)as forças que atuam sobre uma partícula resultam de sua interação com outras partículas, (...) que são dadas por *Leis de Forças*, que definem  $\mathbf{F}$  em termos da situação em que a partícula se encontra”. De maneira geral, esta lei diz que [16]:

*“Um corpo move-se de maneira que a variação da quantidade de movimento em relação ao tempo é igual à força aplicada sobre ele. A direção e o sentido são iguais aos da força aplicada”.*

Sob esse aspecto, matematicamente a força resultante  $\mathbf{F}$  das interações sobre uma partícula é dado como

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt}, \quad (2.2)$$

ou seja, a derivada do momento linear em relação ao tempo  $t$ . Usando a equação (2.1), considerando o movimento em uma dimensão e a massa do corpo constante, tem-se

$$\mathbf{F} = \frac{d(m \cdot \mathbf{v})}{dt} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad (2.3)$$

e, sabendo que a velocidade é a variação da posição da partícula em relação ao tempo

$$\mathbf{F} = m \frac{d^2\mathbf{x}(t)}{dt^2}, \quad (2.4)$$

dessa maneira tem-se de fato a proporcionalidade entre aceleração e força.

## 2.3 Princípio da Ação e Reação

A *Terceira Lei de Newton* descreve a atuação das forças entre dois corpos distintos [17] e é chamada de *Princípio da Ação e Reação*:

*“Se dois corpos exercem forças um sobre o outro, então essas forças são de igual magnitude e em sentidos opostos”.*

Em outras palavras, num sistema isolado, a força  $\mathbf{F}_1$  aplicada por um corpo (ação), a força  $\mathbf{F}_2$  aplicada no sentido contrário pelo outro corpo (reação), de massas  $m_1$  e  $m_2$ , respectivamente, verifica-se que

$$\mathbf{F}_1 = -\mathbf{F}_2. \quad (2.5)$$

Figura 2.2: Forma de se observar a idéia do Princípio da Ação e Reação: em dois corpos distintos agem uma força de ação e no outro uma força de reação de igual intensidade.

O sinal negativo refere-se aos sentidos opostos das forças aplicadas. De acordo com a segunda lei pode-se afirmar que

$$\frac{d\mathbf{p}_1}{dt} = -\frac{d\mathbf{p}_2}{dt}. \quad (2.6)$$

Lembrando a definição de momento (equação (2.1)) é possível reescrever a equação acima da seguinte forma

$$m_1 \frac{d\mathbf{v}_1}{dt} = -m_2 \frac{d\mathbf{v}_2}{dt}. \quad (2.7)$$

Como a aceleração ( $a$ ) de um corpo é dada pela variação da velocidade em função do tempo, então

$$m_1 \cdot \mathbf{a}_1 = -m_2 \cdot \mathbf{a}_2. \quad (2.8)$$

Com isso, usando a relação (2.8) conclui-se que

$$\frac{m_2}{m_1} = -\frac{\mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_2}. \quad (2.9)$$

Fica fácil perceber que a razão entre as massas é positiva, já que umas das acelerações tem valor negativo devido ao sentido do movimento desses corpos.

## 2.4 Comentários sobre as leis de Newton

Nesta seção são apresentados alguns comentários sobre as leis de Newton que merecem ser mais bem explicadas no que diz respeito às definições empregadas, e também aos conceitos implícitos que estão presentes nesse contexto. Esses esclarecimentos vêm ao encontro da visão geral necessária para o entendimento desses resultados.

A definição dada para força ocorre somente na segunda lei, contudo ela aparece no contexto da primeira. Isso não resulta num problema grave, pois a sua participação restringe-se a um dado qualitativo.

A concepção de se ter uma massa constante na segunda lei, chamada de *massa inercial* pressupõe que tal massa é uma característica particular do corpo e assim, será a mesma em qualquer circunstância. Não obstante, a forma usual de se atribuir a massa a uma partícula é pela comparação de seu peso com o peso de outro corpo para o qual essa grandeza é conhecida. Este procedimento é uma consequência da segunda lei onde a força atuante sobre o corpo é somente a força peso e, desta forma, sua aceleração é a aceleração da gravidade, denotando-a *massa gravitacional*. No caso da mecânica clássica, consideram-se as massas inercial e gravitacional como sendo iguais. Essa igualdade é bastante útil para a Teoria da Relatividade Geral chamado de *Princípio da Equivalência*.

Com relação à terceira lei vale a pena ressaltar que a força de ação e a força de reação não podem ser aplicadas em um mesmo corpo, mas sempre em corpos diferentes. Esse princípio pode ser aplicado para um sistema de muitas partículas, desde que haja a possibilidade de estudar as interações entre duas partículas separadamente.

Existe ainda uma outra forma de se explorar a terceira lei. Ela pode ser obtida da análise do conceito de momento. Partindo da equação (2.6) tem-se como resultado

$$\frac{d\mathbf{p}_1}{dt} + \frac{d\mathbf{p}_2}{dt} = 0 \quad \iff \quad \frac{d(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)}{dt} = 0, \quad (2.10)$$

isso quer dizer que  $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$  é constante, para o caso em que não há forças externas atuando sobre as partículas. Tal resultado é conhecido como *Conservação do Momento*: o momento linear total  $\mathbf{p}$  de um sistema de partículas é conservado quando a força resultante sobre ele for nula.

## 2.5 Trabalho e Energia de uma partícula

Se uma partícula movimenta-se de um ponto  $\mathbf{X}$  para um outro ponto  $\mathbf{Y}$  sob a ação de uma força  $\mathbf{F}$ , diz-se então que esta partícula realizou trabalho ou que o trabalho foi realizado sobre a partícula. O trabalho realizado, nestas condições, é definido como[17]

$$W_{XY} = \int_{\mathbf{X}}^{\mathbf{Y}} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r}. \quad (2.11)$$

Tratando  $\mathbf{F}$  como a força resultante tem-se

$$\mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = m \cdot \frac{d\mathbf{v}}{dt} \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} dt = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} \cdot \mathbf{v} dt = \frac{m}{2} \frac{d}{dt} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}) dt = \frac{m}{2} \frac{d}{dt} (v^2) dt = d \left( \frac{1}{2} m v^2 \right). \quad (2.12)$$

Sabendo que  $T = \frac{1}{2} m v^2$  é conhecido como a Energia Cinética de uma partícula, verifica-se que

$$W_{XY} = T(\mathbf{v}) \Big|_{\mathbf{Y}} - T(\mathbf{v}) \Big|_{\mathbf{X}}. \quad (2.13)$$

No entanto, nem sempre é possível trabalhar com a energia cinética de uma partícula. Há muitos casos em que há trabalho sem variação da energia cinética, dependendo somente das posições inicial e final da partícula. Essas propriedades são descritas pela Energia Potencial ( $U$ ). Assim, uma outra forma de determinar o trabalho é através da variação de  $U$ .

Partindo da equação (2.11) e da definição da energia potencial fornecida pela força  $\mathbf{F}$  tem-se

$$\int_{\mathbf{x}}^{\mathbf{Y}} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = U \Big|_{\mathbf{x}} - U \Big|_{\mathbf{Y}}. \quad (2.14)$$

Então, para o caso unidimensional, pode-se definir a força  $\mathbf{F}$  como

$$\mathbf{F} = -\frac{d}{dx}U. \quad (2.15)$$

Através destes resultados define-se a Energia Mecânica Total da partícula como

$$E = T + U. \quad (2.16)$$

Quando a energia potencial não depende do tempo, ou seja,  $\frac{\partial U}{\partial t} = 0$  temos que a força  $F$  é conservativa. Essa conclusão é conhecida como o *Princípio da Conservação de Energia* [17]

*A Energia mecânica total  $E$  de uma partícula sujeita a uma força conservativa é constante no tempo.*

## 2.6 Equilíbrio

Ao se estudar o movimento de uma partícula, uma condição bastante analisada é o seu equilíbrio. O equilíbrio pode ser dito Estável, Instável ou Neutro. Se o equilíbrio é estável significa que a partícula, quando perturbada, retorna ao seu estado inicial. Caso ocorra uma perturbação e a partícula afasta-se do seu estado inicial então o equilíbrio é dito instável. E se a perturbação não modificar o estado da partícula é chamado equilíbrio neutro.

Para expressar matematicamente essa definição de equilíbrio, expande-se a energia potencial  $U(x)$  em série de Taylor em torno de um ponto de equilíbrio. Por simplicidade,

assume-se  $x = 0$  ao invés de  $x = x_0$  (senão será necessário uma redefinição de coordenadas).

Assim,

$$U(x) = U_0 + x \left( \frac{dU}{dx} \right)_0 + \frac{x^2}{2!} \left( \frac{d^2U}{dx^2} \right)_0 + \frac{x^3}{3!} \left( \frac{d^3U}{dx^3} \right)_0 + \dots \quad (2.17)$$

O potencial  $U_0$  para  $x = 0$  é simplesmente uma constante e portanto pode ser definido como zero sem perda de generalidade. Se  $x = 0$  refere-se ao ponto de equilíbrio então,

$$\left( \frac{dU}{dx} \right)_0 = 0 \quad \text{Ponto de Equilíbrio} \quad (2.18)$$

Com a expansão dada na equação (2.17) e com a definição dada pela equação (2.18) tem-se a redução de um termo na equação (2.17). Ao se aproximar o suficiente do ponto de equilíbrio  $x = 0$  os termos de ordem maior da expansão acabam tendo valores muito pequenos e, portanto, a função potencial pode ser bem aproximada considerando-se somente o termo de 2ª ordem. A estabilidade do equilíbrio ao qual está sujeita a partícula fica restrita a verificação da derivada de segunda ordem.



Figura 2.3: Um forma de se observar os três tipos de equilíbrio: um corpo esférico em diferentes tipos de superfícies.

O equilíbrio pode ser então caracterizado por:

$$\left( \frac{d^2U}{dx^2} \right)_0 > 0 \quad \text{Equilíbrio Estável} \quad (2.19)$$

$$\left( \frac{d^2U}{dx^2} \right)_0 < 0 \quad \text{Equilíbrio Instável} \quad (2.20)$$

No caso de  $\left( \frac{d^2U}{dx^2} \right)_0$  ser zero, o equilíbrio é chamado de indiferente.

## 2.7 Espaço de Fase

Uma das formas convencionais de visualizar os resultados de uma equação diferencial é através de um gráfico de espaço de fase que, neste caso, ilustra muito bem a questão do equilíbrio da partícula, assim como uma imagem qualitativa do seu comportamento em função das condições iniciais.

Em geral, este gráfico é dado pela coordenadas da posição e velocidade. As curvas mostradas na figura 2.4 descrevem, como exemplo, o espaço de fase de uma partícula sujeita ao potencial de Morse (equação (1.1) quando  $\alpha = 0$  ).

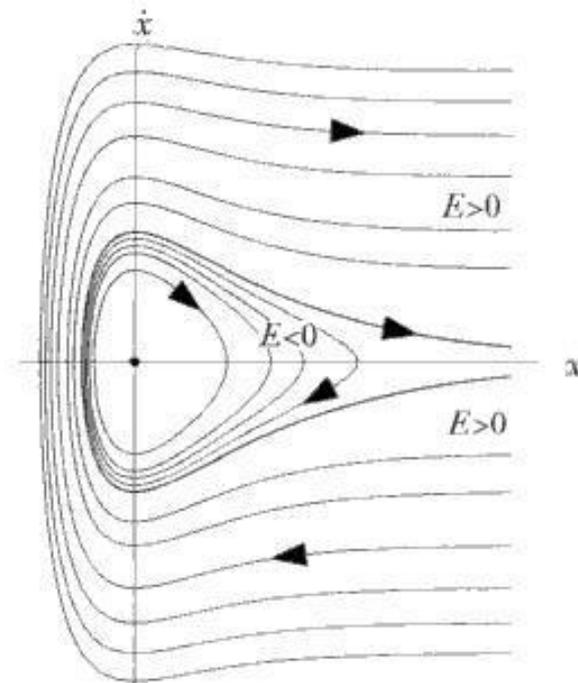


Figura 2.4: Espaço de Fase de uma partícula sujeita ao potencial de Morse [18]. Órbitas fechadas representam valores de energia negativos. Quando  $E = 0$  há uma separação entre órbitas abertas e fechadas. Por último, se a energia mecânica da partícula for positiva formam-se órbitas abertas.

Com as informações fornecidas pelo gráfico do espaço de fase tem-se uma boa noção teórica para solucionar a equação de movimento (equação (2.16)).

# Capítulo 3

## Solução da Equação de Movimento

O objetivo específico deste capítulo é encontrar uma expressão para a posição da partícula sujeita ao potencial de Morse Generalizado e dos potenciais simétricos em função do tempo para determinados valores dos parâmetros  $a, b, D$  e  $\alpha$ . Uma forma de conseguir esse resultado é através da equação de movimento. Relacionando a equação (2.15) com a segunda lei de Newton tem-se:

$$F = m \frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{dU}{dx} \quad (3.1)$$

Dessa forma, utilizando o potencial de Morse Generalizado, dado pela equação (1.1) e, seguindo os mesmos procedimentos mostrados em [19], tem-se que

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{d}{dx} \left( D(e^{-ax} - 1)^2 + \alpha D e^{bx} - D \right) \quad (3.2)$$

isso quer dizer que

$$\frac{d^2x}{dt^2} - \frac{2Da}{m} e^{-2ax} + \frac{2Da}{m} e^{-ax} + \frac{\alpha Db}{m} e^{bx} = 0 \quad (3.3)$$

Colocando  $\frac{d}{dt}$  em evidencia e integrando a equação tem-se

$$\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + \underbrace{\frac{2D}{m}e^{-2ax} - \frac{4D}{m}e^{-ax} + \frac{2\alpha D}{m}e^{bx}}_{\frac{2}{m}U(x)} = \epsilon \quad (3.4)$$

sendo  $\epsilon$  a constante de integração.

O resultado dado pela equação (3.4) mostra que a constante  $\epsilon$  está diretamente relacionada com a energia e associando as equações (3.4) e (2.16) conclui-se que

$$E = \frac{m}{2}\epsilon. \quad (3.5)$$

Essa conclusão é um resultado válido para todos os casos do potencial de Morse generalizado, exceto quando  $b = 0$ . Os detalhes dessa particularidade serão dados numa seção deste capítulo.

Manipulando adequadamente os termos da equação (3.4) tem-se que

$$\int_{x_0}^x \left( \sqrt{\frac{2D}{m} \left( \frac{E}{D} - e^{-2ax} + 2e^{-ax} - \alpha e^{bx} \right)} \right)^{-1} dx = t - t_i \quad (3.6)$$

tal que  $x_0$  corresponde a posição no instante  $t_i$ .

Fazendo a substituição  $y = e^{ax}$  chega-se a seguinte equação integral

$$\int_{y_i}^y \left( \frac{E}{D} y^2 - \alpha y^{\frac{b}{a}+2} + 2y - 1 \right)^{-1/2} dy = \omega_0(t - t_i) \quad (3.7)$$

onde  $\omega_0 = \sqrt{\frac{2Da^2}{m}}$  e  $t_i$  é o tempo inicial da partícula.

A partir daí os desenvolvimentos dessa equação são realizados diferentemente para cada valor de  $b$  e  $\alpha$  adotado. Devido a essas mudanças nos parâmetros, se faz necessário a resolução da equação diferencial (3.7) caso a caso. Os valores estudados de  $b$  foram  $0$ ,  $-a$  e  $-2a$ . Nesses casos a solução é obtida em termos de funções elementares. Isso pode ser visto observando que a equação integral a ser solucionada em (3.7) não muda a sua forma,

isto é, o grau do polinômio não se altera. Portanto, é possível utilizar a mesma técnica de integração usada para solucionar o potencial de Morse. O reflexo dessas mudanças de  $\alpha$  nos coeficientes pode ser percebido analisando o valor do mínimo nesses potenciais.

A resolução da equação (3.7) é realizada através de algumas manipulações algébricas de maneira que se obtenha duas frações onde aplicam-se substituições de variáveis até se chegar no resultado (vide apêndice B).

### 3.1 Caso em que $\alpha = 0$ : Potencial de Morse

Se utilizarmos  $\alpha = 0$  no potencial (1.1) tem-se o potencial de Morse. Então, o potencial é dado por

$$U(x) = D(e^{-ax} - 1)^2 - D. \quad (3.8)$$

Sob essa condição a equação (3.7) é reescrita como

$$\int_{y_i}^y \left( \frac{E}{D} y^2 + 2y - 1 \right)^{-1/2} dy = \omega_0(t - t_i), \quad (3.9)$$

Neste caso, os resultados obtidos dependem das condições iniciais da partícula, em especial, de sua energia, pois para valores diferentes de energia (positivo, negativo ou nula) as soluções encontradas são diferentes. As soluções encontradas para partícula sem energia ( $E = 0$ ), com valores de energia positivos ( $E > 0$ ) e com energia negativa ( $E < 0$ ) são, respectivamente

$$x(t) = \frac{1}{a} \ln \left( \frac{1 + \omega_0^2(t - t_i)^2}{2} \right), \quad (3.10)$$

onde  $t'_i = t_i - \frac{m}{2Da} \left( \frac{4D}{m} y_i - \frac{2D}{m} \right)^{\frac{1}{2}}$  e  $y_i = e^{ax_i}$ ;

$$x(t) = \frac{1}{a} \ln \left( \frac{D}{E} \left( \sqrt{1 + \frac{E}{D}} \cosh \left[ \left( \frac{E}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \omega_0(t - t_i) \right] - 1 \right) \right), \quad (3.11)$$

com  $t'_i = t_i - \frac{2}{\gamma} \operatorname{arccosh} \left( \left( \frac{y_i - y_2}{y_1 - y_2} \right)^{1/2} \right)$ ,  $y_1 = -\frac{D}{E} + \frac{D}{E} \sqrt{\frac{D+E}{D}}$ ,  $y_2 = -\frac{D}{E} - \frac{D}{E} \sqrt{\frac{D+E}{D}}$  e  $\gamma = \left( \frac{E}{D} \right)^{1/2} \omega_0$ . Quando for o caso de energia negativa tem-se

$$x(t) = \frac{1}{a} \ln \left( -\frac{D}{E} \left( 1 - \sqrt{\frac{E+D}{D}} \cos \left[ \left( \frac{-D}{E} \right)^{1/2} \omega_0 (t - t'_i) \right] \right) \right), \quad (3.12)$$

tal que  $t'_i = t_i + \frac{2}{\lambda} \operatorname{arccos} \left( \left( \frac{y_1 - y_i}{y_1 - y_2} \right)^{1/2} \right)$ ,  $y_1 = \frac{D}{|E|} + \frac{D}{|E|} \sqrt{\frac{D+E}{D}}$ ,  $y_2 = \frac{D}{|E|} - \frac{D}{|E|} \sqrt{\frac{D+E}{D}}$  e  $\lambda = \left( -\frac{|E|}{D} \right)^{1/2} \omega_0$ .

No trabalho desenvolvido por DeMarcus [4],  $t'_i$  não é bem definido. Existe uma diferença em relação a  $t_i$ , no entanto não há nenhum comentário referente a outros valores serem relevantes em sua determinação como é o caso, por exemplo, da energia. Outra propriedade que merece destaque é que  $t'_i$  tem um valor específico para cada um dos três casos ( $E = 0$ ,  $E > 0$  e  $E < 0$ ). Estes valores são fundamentais no estudo do potencial de Morse Generalizado, pois uma variação nestes resultados provoca uma mudança expressiva no espaço de fase descrito pelas equações (3.10), (3.11) e (3.12) e, portanto, nos resultados. Esse é um dos resultados importantes apresentados neste trabalho: a determinação clara dessa constante, expressando a dependência das condições iniciais e das constantes envolvidas [19].

## 3.2 Caso em que $b = 0$

Quando  $b = 0$ , o potencial não mostra alterações significativas na forma do poço em relação ao potencial de Morse, apresentando apenas um deslocamento da curva preta da figura 1.1. Isso é confirmado pela forma da função que descreve esse potencial (equação (3.13) quando  $b = 0$ ). Assim o resultado esperado é o mesmo obtido anteriormente apenas com um deslocamento de energia.

Neste caso, o potencial adquire a seguinte forma

$$U(x) = D(e^{-ax} - 1)^2 + D(\alpha - 1). \quad (3.13)$$

Com essa formulação, o potencial é apresentado na figura 3.1, fixando os parâmetros:  $D = 1$ ,  $a = 1$  e  $\alpha = 0.5$ , para exemplificar.

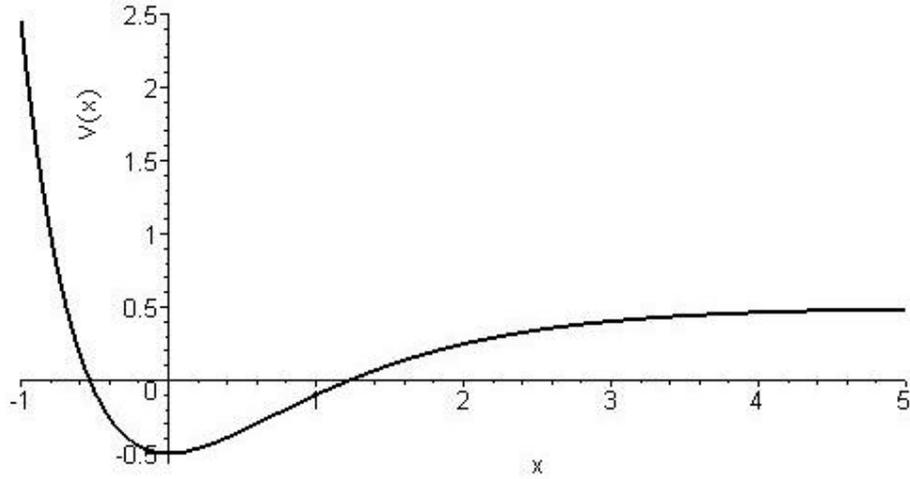


Figura 3.1: Potencial de Morse Generalizado no caso em que  $b = 0$ ,  $D = a = 1$  e  $\alpha = 0.5$ .

Analisando o gráfico, percebe-se que há um deslocamento do potencial em relação ao eixo vertical se comparado ao potencial de Morse.

A integral definida na equação (3.7) com  $b = 0$  adquire a seguinte forma

$$\int_{y_i}^y \frac{dy}{\sqrt{\frac{E-\alpha D}{D}y^2 + 2y - 1}} = \omega_0(t - t_i). \quad (3.14)$$

É importante ressaltar que a constante de integração, neste caso, não é diretamente proporcional a energia mecânica total, devido ao termo  $\alpha D$  que, adicionado ao potencial de Morse, exige que este fator seja incluído também na energia. Realizando os mesmos procedimentos para relacionar a constante de integração ( $\epsilon$ ) e a energia mecânica total (feito anteriormente) tem-se que

$$E = \frac{m}{2}\epsilon + \alpha D. \quad (3.15)$$

Portanto, os limites da energia para a verificação das soluções não estão somente relacionados com o valor da constante de integração, mas também com o parâmetro  $\alpha$  e com a profundidade  $D$  do poço. Deste modo, a partícula atingirá o nível máximo do poço quando obtiver uma quantidade  $\alpha D$  de energia, ou equivalentemente,  $\epsilon = 0$ .

O caso mais simples para solucionar a equação (3.14) ocorre quando  $E = \alpha D$ , onde o polinômio que aparece no denominador dentro da raiz quadrada tem somente uma raiz, pois esse polinômio de segunda ordem é simplificado e a solução da equação diferencial mostrada na equação (3.14) é dada por

$$x(t) = \frac{1}{a} \ln \left( \frac{1 + \omega_0^2(t - t'_i)^2}{2} \right), \quad (3.16)$$

lembrando que

$$\omega_0^2 = \frac{2Da^2}{m}, \quad (3.17)$$

e sendo o tempo inicial  $t_i$  associado com o parâmetro  $t'_i$  pela relação:

$$t'_i = t_i - \frac{(2y_i - 1)^{\frac{1}{2}}}{\omega_0}, \quad (3.18)$$

onde  $y_i$  refere-se ao valor de  $e^{\alpha x_i}$  dado que  $x_i$  é a posição inicial da partícula.

O segundo tipo de solução para  $b = 0$  é estudado quando a partícula está fora do poço, que, neste caso, corresponde a  $E > \alpha D$ . Assim, as raízes do polinômio da equação (3.14) são

$$y_1 = \frac{-D + D\sqrt{1 + (E - \alpha D)/D}}{(E - \alpha D)}, \quad (3.19)$$

$$y_2 = \frac{-D - D\sqrt{1 + (E - \alpha D)/D}}{(E - \alpha D)}. \quad (3.20)$$

Percebe-se que o discriminante é sempre não-negativo, não ocasionando problemas

com relação a questão de se trabalhar com raízes imaginárias.

Para resolver a equação (3.14), o primeiro passo consiste na separação do integrando em duas frações. Aplicando o método de integração por frações parciais a equação (3.14) adquire a seguinte forma:

$$\frac{1}{(y_1 - y_2)} \underbrace{\int_{y_i}^y \left( \frac{y - y_2}{y - y_1} \right)^{\frac{1}{2}} dy}_{\text{Parte I}} - \frac{1}{(y_1 - y_2)} \underbrace{\int_{y_i}^y \left( \frac{y - y_1}{y - y_2} \right)^{\frac{1}{2}} dy}_{\text{Parte II}} = \left( \frac{E}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \omega_0 (t - t_i). \quad (3.21)$$

Para se resolver a integração dada pela *Parte I* e pela *Parte II*, descritas na equação (3.21), utiliza-se das mesmas substituições de variáveis. Deste modo, aplicam-se as seguintes substituições

$$\omega = y - y_2 = y + \frac{D + D\sqrt{1 + (E - \alpha D)/D}}{(E - \alpha D)}, \quad (3.22)$$

$$z^2 = \frac{\omega^2}{y_1 - y_2} \quad (3.23)$$

e

$$\theta = \operatorname{arccosh}(z). \quad (3.24)$$

É interessante ressaltar que a equação (3.22) será sempre um valor positivo, pois  $y$  refere-se a uma exponencial, valor que é sempre positivo. Com isso, a manipulação da integral pode ser executada sem a preocupação de se encontrar resultados com valores imaginários. Logo, tem-se como resultado que

$$x(t) = \frac{1}{a} \ln \left( \frac{D\sqrt{1 + (E - \alpha D)/D} \cosh(\gamma(t - t'_i)) - D}{(E - \alpha D)} \right) \quad (3.25)$$

com

$$\gamma = \omega_0 \sqrt{\frac{(E - \alpha D)}{D}} \quad (3.26)$$

e

$$t'_i = t_i - \frac{2}{\gamma} \operatorname{arccosh} \left( \left( \frac{y_i - y_2}{y_1 - y_2} \right)^{\frac{1}{2}} \right). \quad (3.27)$$

Para o caso em que  $E < \alpha D$ , ao contrário do caso anterior, deve-se trabalhar com as raízes da seguinte forma:

$$y_1 = \frac{-D - D\sqrt{1 + (E - \alpha D)/D}}{(E - \alpha D)}, \quad (3.28)$$

$$y_2 = \frac{-D + D\sqrt{1 + (E - \alpha D)/D}}{(E - \alpha D)}. \quad (3.29)$$

Pela técnica de integração adotada, as substituições a serem feitas durante o processo de integração são bastante semelhantes às mudanças indicadas nas equações (3.22), (3.23) e (3.24). Neste caso, as substituições aplicadas foram:

$$\omega^2 = y_1 - y = \frac{-D - D\sqrt{1 + (E - \alpha D)/D}}{(E - \alpha D)} - y, \quad (3.30)$$

$$z^2 = \frac{\omega^2}{y_1 - y_2} = \frac{\omega^2}{\frac{2D\sqrt{1+(E-\alpha D)/D}}{(\alpha D - E)}}. \quad (3.31)$$

e

$$\theta = \arccos(z). \quad (3.32)$$

Após estas mudanças, a solução das integrais dadas na equação (3.21) fornece o seguinte resultado:

$$x(t) = \frac{1}{a} \ln \left( \frac{D\sqrt{1 + (E - \alpha D)/D} \cos(\lambda(t - t'_i)) + D}{(\alpha D - E)} \right) \quad (3.33)$$

com

$$\lambda = \omega_0 \sqrt{\frac{(\alpha D - E)}{D}} \quad (3.34)$$

e

$$t'_i = t_i + \frac{2}{\lambda} \arccos \left( \left( \frac{y_1 - y_i}{y_1 - y_2} \right)^{\frac{1}{2}} \right) \quad (3.35)$$

A resolução passo a passo das integrais da equação (3.21) encontra-se no apêndice B.

Novamente, em comparação ao trabalho de DeMarcus [4], é perceptível a diferença

entre os valores de  $t'_i$ , devido a influência das raízes do polinômio que aparece no denominador do integrando da equação (3.14).

### 3.3 Caso em que $b = -a$

Tomando  $b = -a$  o potencial a ser estudado, obtido da equação (1.1), é da forma:

$$U(x) = D(e^{-ax} - 1)^2 + \alpha.D.e^{-ax} - D \quad (3.36)$$

Nessa condição,  $\alpha$  fará parte do coeficiente do termo de primeiro grau do polinômio em  $y(y = e^{-ax})$ , como mostra a equação a seguir:

$$\int_{y_i}^y \left( \frac{E}{D}y^2 + (2 - \alpha)y - 1 \right)^{-1/2} = \omega_0(t - t_i). \quad (3.37)$$

Desta maneira, a energia não dependerá mais de  $\alpha$  e assim retorna ao seu valor comum expresso na equação (3.5).

Fazendo uso do mesmo método de integração, as soluções encontradas possuem algumas propriedades diferentes.

No caso mais simples, isto é, quando  $E = 0$  a solução encontrada para a equação (3.37) foi

$$x(t) = \frac{1}{a} \ln \left( \frac{1}{(2 - \alpha)} + \frac{(2 - \alpha)}{4} \omega_0^2 (t - t'_i)^2 \right) \quad (3.38)$$

onde

$$t'_i = t_i - \frac{2}{(2 - \alpha)} \frac{((2 - \alpha)y_i - 1)^{\frac{1}{2}}}{\omega_0} \quad (3.39)$$

Analogamente ao estudo do caso anterior ( $b = 0$ ), para  $E > 0$ , obtém-se

$$x(t) = \frac{1}{a} \ln \left( \frac{D\sqrt{(2 - \alpha)^2 + 4E/D} \cosh(\gamma(t - t'_i)) - (2 - \alpha)D}{(2E)} \right) \quad (3.40)$$

com  $t'_i$  o mesmo usado no caso anterior com energia superior à medida  $\alpha D$ , dado pela equação (3.27).

E por último , quando  $E < 0$  tem-se

$$x(t) = \frac{1}{a} \ln \left( \frac{-D\sqrt{(2-\alpha)^2 + 4E/D} \cos(\lambda(t-t'_i)) - (2-\alpha)D}{(2E)} \right) \quad (3.41)$$

tal que  $t'_i$  é análogo ao usado no caso anterior onde os valores de energia tem-se a partícula dentro do poço (equação (3.35)).

Ainda no caso  $b = -a$ , quando  $\alpha \geq 2$  a equação diferencial (3.37) possui uma única solução que é dada pelo resultado obtido no caso de energia positiva, expresso na equação (3.40). Isso é resultado dos valores de  $\alpha$  simplesmente deformarem o potencial a ponto de não existir mais um poço. Uma forma típica desses potenciais é exibido na figura 3.2 com  $b = -a, \alpha = 2.5, a = m = D = 1$ .

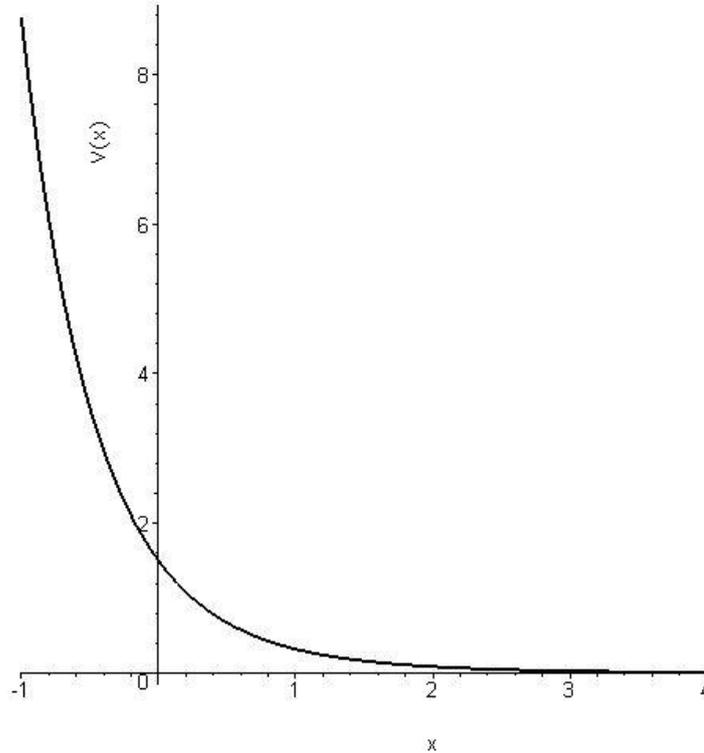


Figura 3.2: Potencial de Morse Generalizado no caso em que  $b = -a$  e  $\alpha = 2.5$  fixando os parâmetros  $a = 1, m = 1$  e  $D = 1$ , destacando a forma sem poço.

### 3.4 Caso em que $b = -2a$

Seguindo os mesmos procedimentos e condições adotados nos casos  $b = 0$  e  $b = -a$ , obtém-se as soluções quando usamos  $b = -2a$ .

Um fato curioso é verificado nos casos em que  $\alpha \leq -1$ , onde não existe uma barreira de potencial, sendo então um caso em que não se tem interesse físico. A figura 3.3 mostra um exemplo desse caso, usando  $\alpha = -1.5$ ,  $a = 1$ ,  $m = 1$  e  $D = 1$

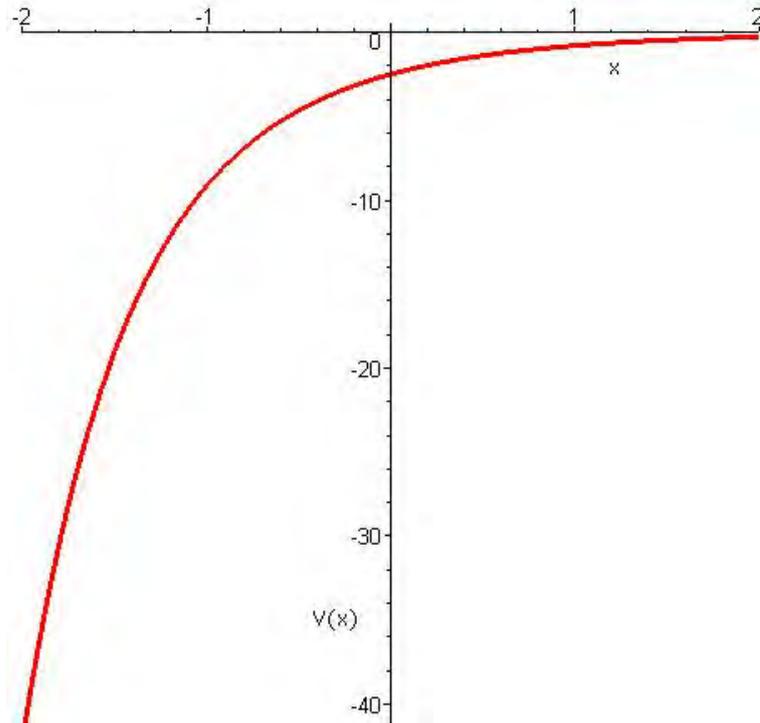


Figura 3.3: Potencial de Morse Generalizado para  $b = -2a$  e  $\alpha = -1.5$  fixando os parâmetros  $a = 1$ ,  $m = 1$  e  $D = 1$ : exemplo de inexistência da barreira de potencial.

Em contrapartida, para outros valores de  $\alpha$  ( $\alpha > -1$ ) as soluções são as seguintes:

$$x(t) = \frac{1}{a} \ln \left( \frac{\alpha + 1}{2} + \frac{\omega_0^2}{2} (t - t'_i)^2 \right) \quad (3.42)$$

para  $E = 0$ , onde

$$t'_i = t_i - \frac{(2y_i - (\alpha + 1))^{\frac{1}{2}}}{\omega_0} \quad (3.43)$$

Se  $E > 0$  a solução obtida é

$$x(t) = \frac{1}{a} \ln \left( \frac{D\sqrt{1 + (\alpha + 1)E/D} \cosh(\gamma(t - t'_i)) - D}{E} \right) \quad (3.44)$$

com  $t'_i$  o mesmo representado, como nos outros casos, pela equação (3.27).

E por fim, casos em que  $E < 0$ ,

$$x(t) = \frac{1}{a} \ln \left( \frac{-D\sqrt{1 + (\alpha + 1)E/D} \cos(\lambda(t - t'_i)) - D}{E} \right) \quad (3.45)$$

tal que  $t'_i$  dado também pela equação (3.35).

### 3.5 Solução para o Potencial de Morse Simétrico

O potencial de Morse permite a criação de dois novos tipos de potenciais simétricos. A solução da equação de movimento é obtida através dos mesmos procedimentos usados no potencial de Morse Generalizado. Esta resolução, em termos gerais, é feita passo a passo no Apêndice B, nesta seção são indicadas as mudanças de variáveis aplicadas ao problema.

Os potenciais de Morse Simétricos são dados por:

$$V_{Ml}(x) = D(e^{a|x|} - 1)^2 - D \quad (3.46)$$

$$V_{Mr}(x) = D(e^{-a|x|} - 1)^2 - D \quad (3.47)$$

onde  $V_{Ml}$  é o potencial de Morse simétrico à esquerda e  $V_{Mr}$  simétrico à direita. O gráfico visto na figura 3.4 mostra os dois potenciais usando os parâmetros  $D = a = 1$  como exemplo.

Para simplificar a notação são adotadas as notações a seguir

$$y_i = e^{ax_i} \quad (3.48)$$

$$y_i^* = e^{-ax_i} \quad (3.49)$$

$$y_n = -\frac{D(1 + \sqrt{E/D + 1})}{E} \quad (3.50)$$

$$y_p = -\frac{D(1 - \sqrt{E/D + 1})}{E} \quad (3.51)$$

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{2Da^2}{m}} \quad (3.52)$$

$$t_r = t_i + \frac{2}{\lambda} \arccos \left( \sqrt{\frac{(y_n - y_i)}{y_n - y_p}} \right) \quad (3.53)$$

$$t_l = t_i - \frac{2}{\lambda} \arccos \left( \sqrt{\frac{(y_n - y_i^*)}{y_n - y_p}} \right) \quad (3.54)$$

$$t_z = t_i + \frac{\sqrt{2y_i - 1}}{\omega_0} \quad (3.55)$$

$$t_z^* = t_i + \frac{\sqrt{2y_i^* - 1}}{\omega_0} \quad (3.56)$$

$$t_R = t_i - \frac{2}{\gamma} \operatorname{arccosh} \left( \sqrt{\frac{(y_i - y_n)}{y_p - y_n}} \right) \quad (3.57)$$

$$t_L = t_i - \frac{2}{\gamma} \operatorname{arccosh} \left( \sqrt{\frac{(y_i^* - y_n)}{y_p - y_n}} \right) \quad (3.58)$$

$$\lambda = \sqrt{-\frac{2Ea^2}{m}} \quad (3.59)$$

$$\gamma = \sqrt{\frac{2Ea^2}{m}} \quad (3.60)$$

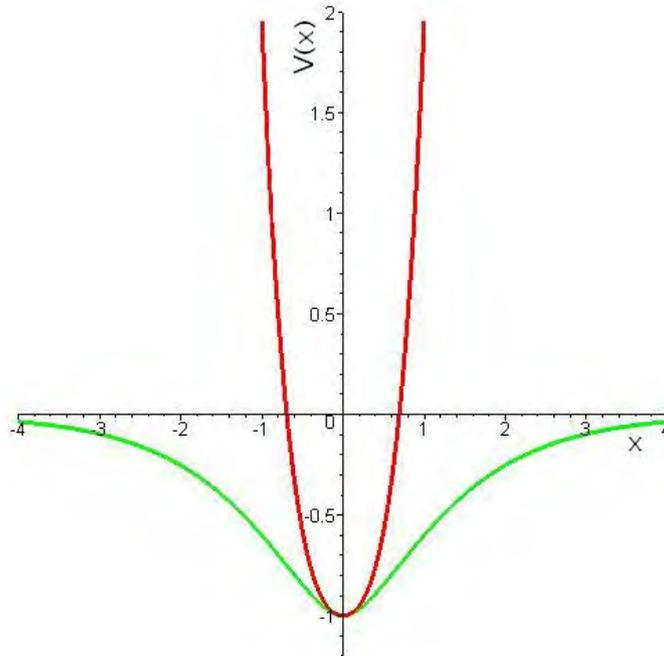


Figura 3.4: Gráfico dos Potenciais de Morse Simétricos. A curva em verde representa o potencial dado na equação (3.47) e a curva em vermelho o potencial descrito na equação (3.46). Nos dois casos adotou-se  $D = a = 1$ .

### 3.5.1 Soluções do Potencial de Morse Simétrico à Esquerda $V_{MI}$

A forma típica do potencial  $V_{MI}$  pode ser observada na figura 3.4, onde percebe-se que ele é confinante, ou seja, caracteriza-se pelo fato de uma partícula sujeita a esse potencial encontrar-se confinada para qualquer estado de energia.

A solução da equação de movimento requer muito cuidado, pois a presença do módulo induz a resolução em dois momentos: (1) para valores positivos de  $x$  e (2) valores negativos. Dessa forma, o potencial é dividido em dois casos:

$$V_{MI} = \begin{cases} D(e^{-ax} - 1)^2 - D & \text{se } x \leq 0 \\ D(e^{ax} - 1)^2 - D & \text{se } x \geq 0 \end{cases} \quad (3.61)$$

Sendo assim, as soluções são determinadas de forma análoga ao caso do potencial de Morse Generalizado, porém é necessário realizar os procedimentos separadamente para os casos em que o potencial é descrito pela equação (3.61) na parte positiva e depois pela parte negativa. O caso em que  $x = 0$  tem solução idêntica nos dois casos.

Os resultados obtidos para a equação de movimento devem ser analisados com relação a duas condições, a posição inicial e a energia total. Contudo, para se descrever o comportamento do sistema deve-se considerar que para um mesmo valor de energia existirá casos em que a partícula inicia seu movimento com valores de posição positivo e depois, dependendo de sua velocidade, adote posições de valores negativos e vice-versa. Portanto, para cada valor de energia tem-se a solução dividida em duas partes.

Quando  $E < 0$  a solução é dada por

$$x(t) = \frac{1}{a} \ln \left( \left( -\frac{D}{E} \left( 1 - \sqrt{(1 + E/D)} \cos(\lambda(t - t_r)) \right) \right) \right) \quad \text{se } x \leq 0 \quad (3.62)$$

e

$$x(t) = -\frac{1}{a} \ln \left( \left( -\frac{D}{E} \left( 1 + \sqrt{(1 + E/D)} \cos(\lambda(t - t_l)) \right) \right) \right) \quad \text{se } x \geq 0 \quad (3.63)$$

No instante em que a partícula atingir o ponto  $x = 0$ , muda-se a função que descreve

a sua posição, de acordo com as equações (3.62) e (3.63) . Então é necessário saber em que instante isso ocorre, justamente para que se utilize a função adequadamente na descrição do movimento da partícula. Adotando  $x = 0$  na solução (3.62) tem-se que esse instante é dado por

$$t = t_l \pm \frac{1}{\lambda} \arccos \left( \sqrt{1 + E/D} \right) \quad (3.64)$$

e se no caso de usar  $t_r$  no lugar de  $t_l$  obter-se-á o mesmo resultado. Porém a resultado dado em (3.64) é válido quando a partícula está saindo da parte positiva e entrando na parte negativa. Ao fazer a substituição de  $t_r$  por  $t_l$ , os instantes calculado são usados no caminho contrário, isto é, do negativo para o positivo.

Para os casos em que  $E = 0$ , as soluções da equação de movimento são separadas da seguinte maneira

$$x(t) = \frac{1}{a} \ln \left( \frac{1 + \omega_0^2(t - t_z)^2}{2} \right) \quad (3.65)$$

para valores de  $x > 0$ . Já no caso de  $x < 0$ ,

$$x(t) = -\frac{1}{a} \ln \left( \frac{1 + \omega_0^2(t - t_z^*)^2}{2} \right) \quad (3.66)$$

Nestes dois casos o tempo para que se modifique a função da posição a ser usada é dado por

$$t = t_z \pm \frac{\sqrt{2}}{2} \quad (3.67)$$

onde  $t_z$  é o tempo inicial adotado para a partícula quando estiver passando da posição positiva para a negativa. O caso oposto utiliza-se  $t_z^*$ .

Quando tem-se  $E > 0$ , novamente as soluções são divididas em dois casos,

$$x(t) = \begin{cases} -\frac{1}{a} \ln \left( \left( -\frac{D}{E} (1 - \sqrt{1 + E/D} \cosh(\gamma(t - t_L))) \right) \right) & \text{se } x \leq 0 \\ \frac{1}{a} \ln \left( \left( -\frac{D}{E} (1 - \sqrt{1 + E/D} \cosh(\gamma(t - t_R))) \right) \right) & \text{se } x \geq 0 \end{cases} \quad (3.68)$$

e os tempos quando  $x = 0$  são dados por

$$t = t_R \pm \frac{\operatorname{arccosh} \left( \sqrt{1 + E/D} \right)}{\gamma}. \quad (3.69)$$

que são os instantes para que a partícula faça a transição de  $x > 0$  para  $x < 0$  e assim a função a ser usada também muda. Se for o caminho no sentido contrário, substitui-se  $t_R$  por  $t_L$ .

### 3.5.2 Soluções encontradas para o potencial de Morse simétrico à direita $V_{Mr}$ .

A curva verde do gráfico representado na figura 3.4, adotando como parâmetros,  $D = a = 1$  mostra a forma deste potencial observa-se que para uma certa quantidade de energia a partícula fica confinada e acima dessa quantidade ela escapa do poço.

A solução dada no caso de  $E < 0$  e  $x < 0$  é exatamente a mesma dada pela equação (3.63). Isso ocorre por causa da simetria, no entanto, deve-se ressaltar que neste caso os valores são aceitos quando a posição for negativa, encontrando-se no espaço de fase as órbitas fechadas dessa solução; ao contrário do primeiro caso que utiliza a parte em que tem-se solução partindo para uma velocidade constante, e logo, órbitas abertas. Esta reciprocidade já não acontece para o caso de  $E < 0$  e  $x > 0$ . A solução encontrada modifica-se apenas no sinal do termo que multiplica o cosseno dentro do logaritmando, como é visto na seguinte equação

$$x(t) = \begin{cases} -\frac{1}{a} \ln \left( \left( -\frac{D}{E} (1 + \sqrt{(1 + E/D) \cos(\lambda(t - t_l))}) \right) \right) & \text{se } x \leq 0 \\ \frac{1}{a} \ln \left( \left( -\frac{D}{E} (1 + \sqrt{(1 + E/D) \cos(\lambda(t - t_r))}) \right) \right) & \text{se } x \geq 0 \end{cases} \quad (3.70)$$

O instante em que a partícula atinge o ponto  $x = 0$  é

$$t = t_l \pm \frac{1}{\lambda} \arccos \left( -\sqrt{1 + E/D} \right) \quad (3.71)$$

quando ela encontra-se com valor de posição positivo, caso contrário, deve-se trocar  $t_l$  por  $t_r$  para se obter o tempo de transição adequado.

Para  $E = 0$  as soluções para qualquer valor de  $x$  são iguais as equações (3.65) e (3.66) porém usa-se para valores de posição opostos, ou seja, a equação (3.65) é usada quando

$x > 0$  e neste caso é usado para  $x < 0$ . O mesmo raciocínio se faz para a equação (3.66).

Quando  $E > 0$ , segue-se o mesmo pensamento do caso  $E = 0$ . Logo, para  $x < 0$

$$x(t) = \begin{cases} -\frac{1}{a} \ln \left( \left( -\frac{D}{E} (1 - \sqrt{1 + E/D} \cosh(\gamma(t - t_L^*))) \right) \right) & \text{se } x \leq 0 \\ \frac{1}{a} \ln \left( \left( -\frac{D}{E} (1 - \sqrt{1 + E/D} \cosh(\gamma(t - t_R))) \right) \right) & \text{se } x \geq 0 \end{cases} \quad (3.72)$$

para o caso da partícula encontrar-se em posições negativas,  $t_L^* = t_i + \frac{2}{\gamma} \operatorname{arccosh} \left( \sqrt{\frac{(y_i^* - y_n)}{y_p - y_n}} \right)$ .

O instante em que a partícula vindo de um posição positiva chega em  $x = 0$  é dado por

$$t = t_R \pm \frac{1}{\gamma} \operatorname{arccosh} \left( \sqrt{1 + E/D} \right) \quad (3.73)$$

caso contrário,

$$t = \pm \frac{1}{\gamma} \operatorname{arccosh} \left( \sqrt{1 + E/D} \right) - t_L^* \quad (3.74)$$

Fica claro que as soluções da equação de movimento dos dois potenciais simétricos são bem semelhantes, necessitando de poucas adequações para que as soluções sejam apropriadas. Entretanto, suas propriedades são bem distintas, pois o potencial  $V_{MI}$  tem sempre a partícula confinada o que nem sempre ocorre no outro caso. No capítulo seguinte são mostrados os espaços de fases destes potenciais, além dos outros potenciais das seções anteriores.

# Capítulo 4

## Espaços de Fases das soluções encontradas

Uma forma de observar os resultados das equações de movimento obtidas no capítulo anterior é através do gráfico de Espaço de Fase, onde é expresso a velocidade da partícula sujeita ao potencial estudado em função de sua posição. É notável que todos esses gráficos devem ter forma semelhante ao apresentado na figura 2.4, com órbitas fechadas dentro do poço e abertas fora dele. Este tipo de gráfico fornece informações bastante valiosas a respeito do comportamento da partícula, principalmente com relação ao seu deslocamento referente a uma dada condição inicial. Os parâmetros fixados  $a = 1$ ,  $D = 1$  e  $m = 1$  foram os mesmos em todos os gráficos apresentados neste capítulo.

Os gráficos apresentados nas figuras 4.1, 4.2, 4.4 e 4.3 mostram os espaços de fase de uma partícula sujeita ao potencial de Morse Generalizado para cada um dos casos descritos.

Já os gráficos das figuras 4.5, 4.6 descrevem os espaços de fase de uma partícula sujeita ao potencial de Morse Simétrico à esquerda e à direita, respectivamente.

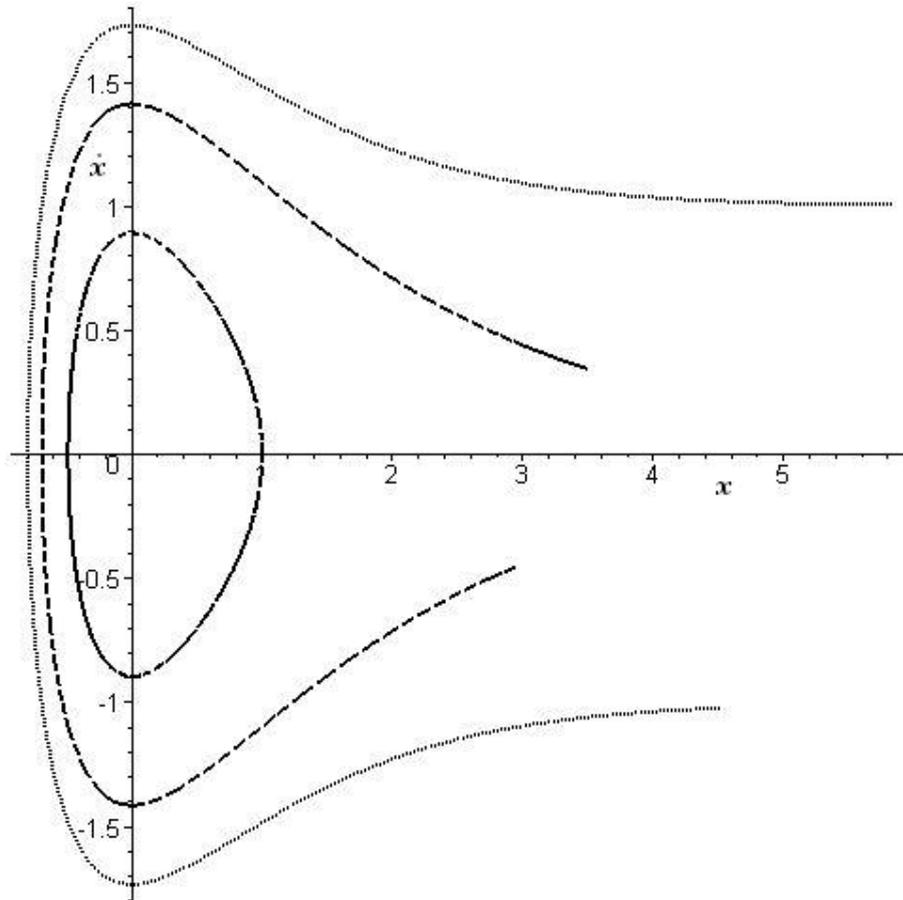


Figura 4.1: Espaço de Fase no caso em que  $b = 0$  e  $\alpha = 1.5$ . Na linha externa:  $E = 2$ , interna  $E = 1.5$  ( $E = \alpha.D$ ) e na órbita fechada:  $E = 0.9$ .

Na figura acima (fig.4.1) a órbita fechada é dada pela solução  $x(t)$ , obtida pela equação (3.33) ( $E < \alpha D$ ), a curva descrita ao centro foi obtida da equação (3.16), ou seja, para  $E = \alpha D$  e a curva externa é a representação da função obtida pela equação (3.25) em função de suas respectivas velocidades  $v$ , tal que  $v = \frac{d[x(t)]}{dt}$ .

De acordo com o gráfico do potencial, dado pela figura 3.1, confirma-se pelo espaço de fase acima o confinamento da partícula quando sujeita a uma quantidade de energia menor que a altura do poço desse potencial. A solução intermediária mostra que a partícula chega até a barreira do potencial e tende a se aproximar cada vez mais de  $x = 0$ . Já no caso em que a partícula tem mais energia que o limiar do poço, há uma limitação de movimento a esquerda onde aparece a barreira do potencial (ela perde um pouco de sua velocidade e logo atinge uma velocidade constante).

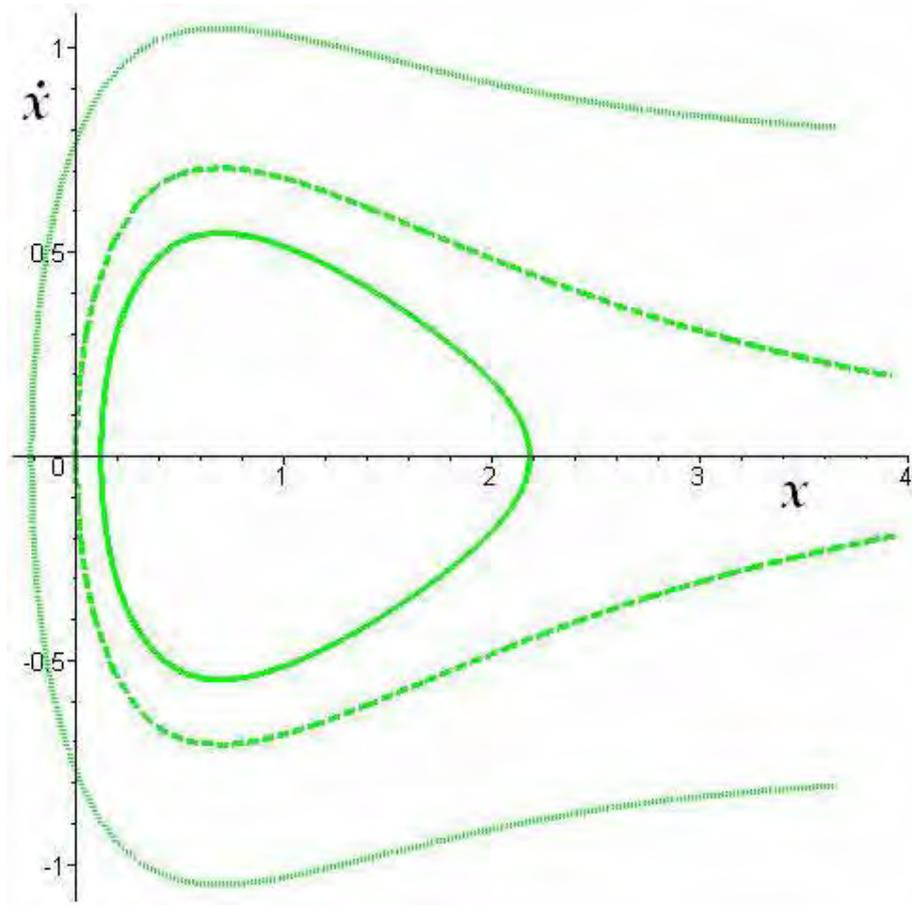


Figura 4.2: Espaço de Fase no caso em que  $b = -a$  e  $\alpha = 0.1$ . Para a curva fechada  $E = -0.5$ , curva intermediária é o caso onde  $E = 0$  e a curva externa adotou-se  $E = 1.1$ .

No caso do resultado mostrado na figura 4.2, as soluções são: a curva fechada vem da equação (3.41), a curva intermediária é dada pela equação (3.38) e a curva externa descrita pela equação (3.40). A diferença apresentada entre este gráfico (figura 4.2) e o anterior (figura 4.1) pode ser percebida no aumento do momento e nas posições onde a partícula chega até a barreira. Isso ocorre porque as soluções são razoavelmente diferentes (basicamente em relação ao tempo inicial) e também pelo uso de outros parâmetros, como é o caso da energia; tempo inicial e o próprio valor do parâmetro  $\alpha$ .

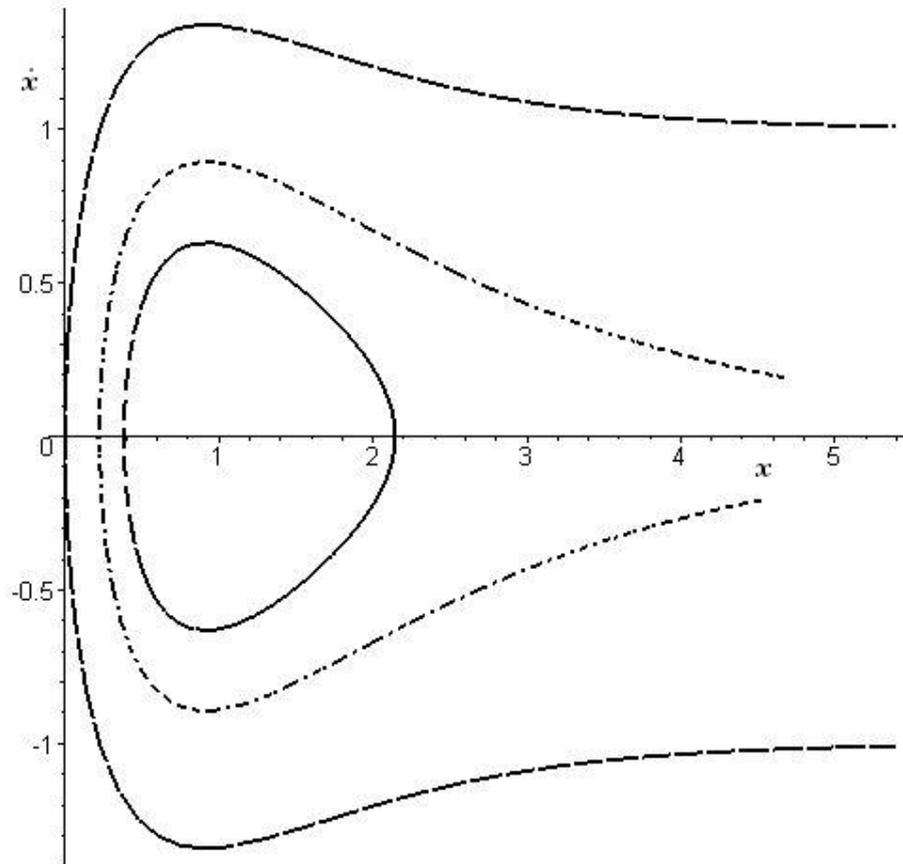


Figura 4.3: Espaço de Fase no caso em que  $b = -2a$  e  $\alpha = 1.5$ .

Na figura 4.3 é mostrado o espaço de fase de um caso em que  $b = -2a$ . A curva fechada é dada pela equação (3.45), a curva intermediária é representada pela equação (3.42) e a curva externa pela equação (3.44). Neste caso, o destaque é dado pelo fato dos valores da posição da partícula nunca atingirem valores negativos. Esse resultado acontece devido aos parâmetros utilizados não conduzirem a valores do potencial (dado pela equação (1.1) quando  $b = -2a$ ) correspondente a posições negativas. Entretanto, a forma do espaço de fase para o caso  $b = -2a$  é extremamente similar aos casos apresentados nas figuras 4.1 e 4.2, com órbita fechada; outra solução tendendo a  $x = 0$  e outra onde a partícula retorna a uma velocidade constante.

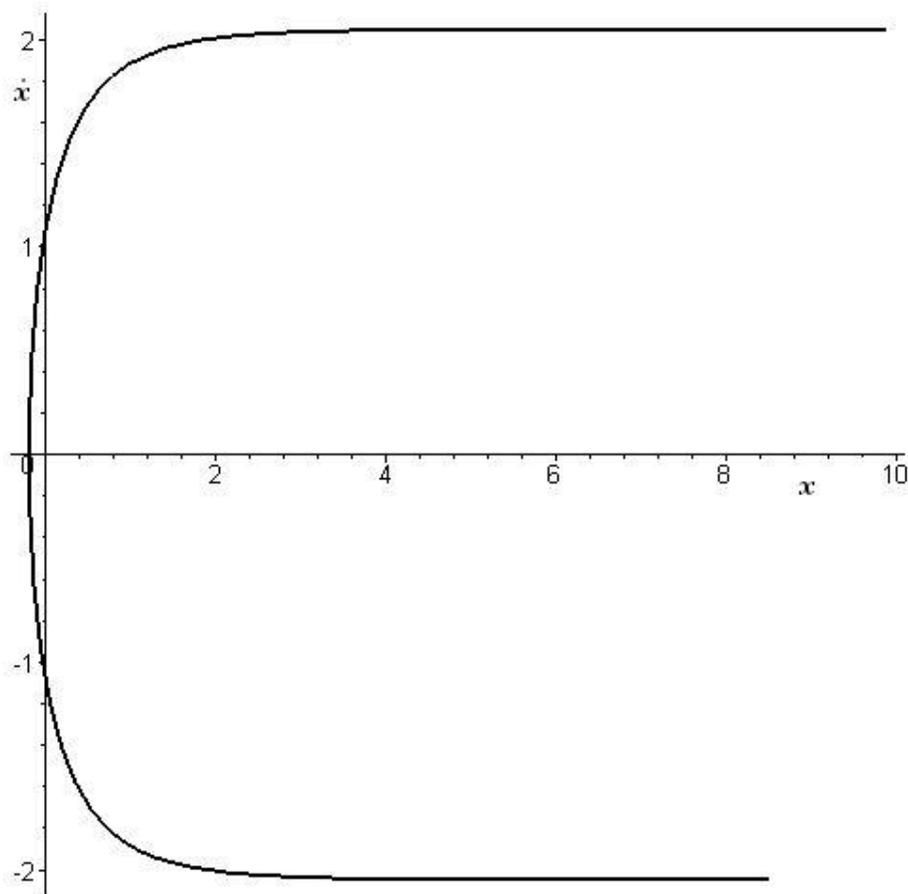


Figura 4.4: Espaço de Fase no caso em que  $b = -a$  e  $\alpha = 2.5$ : Solução válida apenas para valores de energia positivos e  $\alpha \geq 2$ .

O potencial, cujo gráfico é mostrado na figura 3.2, apresenta somente a solução para valores de energia positivos. Isso acontece porque o potencial tem a particularidade de não apresentar um poço em seu gráfico quando o parâmetro  $\alpha$  tem valores maiores ou iguais que dois. Na figura 4.4 é mostrada a única solução (vide equação (3.40)). O valor de  $\alpha$  adotado foi 2.5 e energia 2.1.

A partir destes gráficos percebe-se que os resultados obtidos são bem semelhantes e conduzem a curvas consistentes com os potenciais estudados. Os resultados são bastante abrangentes permitindo determinar exatamente a velocidade da partícula em função de sua posição, seja qual for a sua energia total. A semelhança das soluções pode ser notada pelo tratamento das equações. A modificação feita nos coeficientes da equação diferencial de origem (equação (3.7) não traz mudanças significativas no comportamento da partícula, facilitando a análise desses dados.

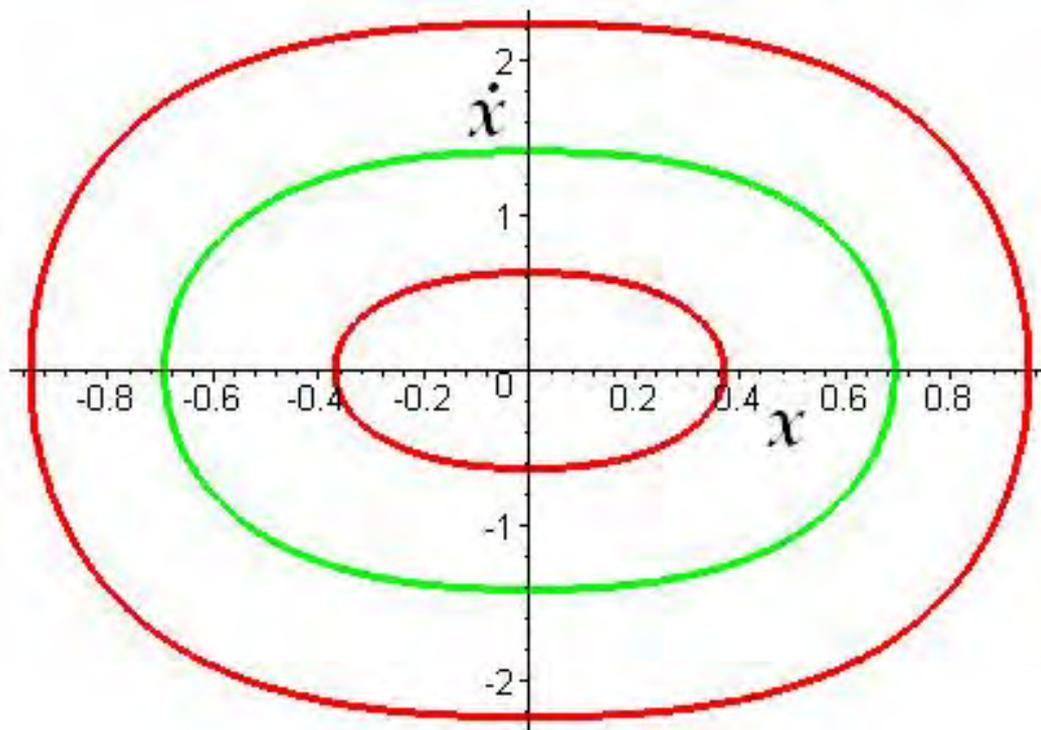


Figura 4.5: Espaço de Fase de uma partícula sujeita ao potencial de Morse Simétrico à esquerda adotando os parâmetros  $a = D = m = 1$ . Na curva externa foi dado como condições iniciais  $x_i = 1$  e  $E = 1.5$ . Para a curva intermediária (em verde) tem-se  $E = 0$ . E na órbita fechada utilizou-se  $E = -0.8$ .

O espaço de fase acima, dado pelas equações (3.68) quando a partícula estiver com energia positiva, (3.65) para  $x > 0$ , (3.66) para  $x < 0$  se ela estiver com energia nula e (3.62) juntamente com (3.63) em seus respectivos casos quando for para energia negativa, mostra o resultado de uma partícula sujeita a um potencial do tipo confinante. Isso fica bastante claro com esse gráfico pois tem-se como resultado, para qualquer valor de energia, curvas fechadas. A curva fechada interna é dada pelas equações tal tal, a curva intermediária é representada pela equação tal e a curva externa pela equação tal. Com um resultado analítico para a equação de movimento, é possível trabalhar com problemas interessantes onde é necessário aplicar um potencial confinante.

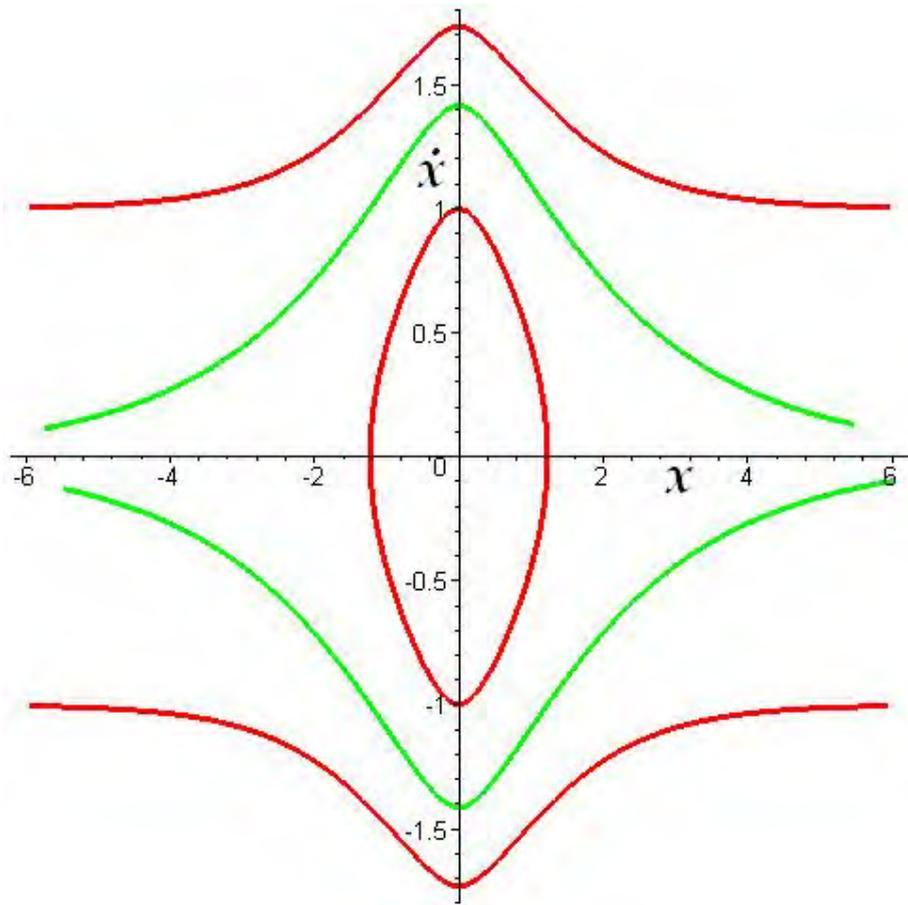


Figura 4.6: Espaço de Fase de uma partícula sujeita ao potencial de Morse Simétrico à direita usando  $D = a = m = 1$ , tendo como condições iniciais  $x_i = 1$  e  $E = 0.5$  para curva externa,  $E = 0$  para a curva em vermelho e  $E = -0.5$  para a curva que forma uma órbita fechada.

Esta figura mostra que o potencial não tem barreira pois, exceto na curva interna, a partícula não inverte o sentido de seu movimento. No entanto, no casos de energia negativa ela mantém presa dentro do poço de potencial formando órbitas fechadas. Lembrando que as equações (3.70), (3.72), (3.65) e (3.66) que determinam este espaço de fase.

# Capítulo 5

## Conclusão

A solução encontrada hoje na literatura [4] que trata somente do potencial de Morse tem uma deficiência no que diz respeito a aplicação das condições iniciais. As soluções encontradas dadas pelas equações (3.10), (3.11), (3.12), (3.16), (3.25), (3.33), (3.38), (3.40), (3.41), (3.42), (3.44), (3.45), (3.16), (3.62), (3.63), (3.65), (3.66), (3.68), (3.70) e (3.72) supera essa deficiência e mostra que o método de integração direta utilizado foi efetuado com sucesso na equação diferencial (3.7). Esses resultados foram analisados detalhadamente e evidenciam a importância de alguns parâmetros essenciais na descrição do movimento de uma partícula, como é o caso da energia.

Além disso, as soluções encontradas permitem alongar o estudo clássico de potenciais derivados do potencial de Morse. Os resultados abrem possibilidade de utilização das diferentes funções encontradas na descrição de sistemas físicos podendo levar, assim, a um melhor resultado dos modelos adotados. A forma generalizada para o potencial de Morse poderá ser testada com vista a uma melhor descrição de modelos mecânicos nos quais, até o momento, aplicam-se somente o potencial de Morse original ou até mesmo outros potenciais. Um exemplo seria a análise das ligações de hidrogênio no DNA.

O potencial generalizado ainda tem muitas outras soluções a serem estudadas, como por exemplo, para valores de  $b$  além daqueles apresentados aqui. Nos casos de  $b$  assumir  $a$  ou até mesmo  $2a$ , há um aumento no grau do polinômio que aparece dentro da raiz quadrada do

denominador do integrando aonde aplica-se o método de integração direta (de acordo com a equação (3.7)). Isso representa uma dificuldade adicional para se encontrar uma solução analítica escrita em termos de funções elementares.

Outro estudo onde encontrou-se solução analítica foi feito para os potenciais simétricos de Morse. Uma vez que não são encontradas soluções para as equações de movimento clássica na literatura para esse potencial, esse resultado torna-se importante para o estudo mecânicos que envolvem potenciais semelhantes. Ao contrário dos potenciais tratados até o momento, o Morse simétrico representado pela equação (3.47) não teria uma barreira infinita. Em contrapartida, o potencial simétrico visto na equação (3.46) é um potencial confinante. Com essa característica é possível que este último potencial venha ser uma nova opção para ser aplicado na descrição das ligações de empilhamento entre os nucleotídeos no DNA.

# Apêndice A

## Solução da Equação de Schrödinger Unidimensional usando o Potencial de Morse

Embora o objetivo dessa monografia seja o estudo do potencial de Morse em Física Clássica, a aplicação maior desse potencial está, até o momento, no âmbito da Mecânica Quântica. Nesse apêndice é mostrada a solução analítica deste potencial em estudos quânticos [20], ou seja, é encontrada uma solução para a equação de onda de Schrödinger.

Lembrando que o potencial de Morse é dado por:

$$V_M(x) = D(1 - e^{-ax})^2. \quad (\text{A-1})$$

A equação de Schrödinger unidimensional para um potencial qualquer  $V(x)$  é dada por:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x). \quad (\text{A-2})$$

Colocando  $V(x) = V_M(x)$  tem-se:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + D(1 - e^{-ax})^2 \right] \psi(x) = E\psi(x), \quad (\text{A-3})$$

ou melhor,

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + D - 2e^{-ax} + De^{-2ax} \right] \psi(x) = E\psi(x). \quad (\text{A-4})$$

Multiplicando todos os termos por  $-\frac{2m}{\hbar^2}$ ,

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} - \frac{2mD}{\hbar^2} e^{-2ax} + \frac{4mD}{\hbar^2} e^{-ax} - \frac{2mD}{\hbar^2} \right] \psi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x). \quad (\text{A-5})$$

Então

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} - \frac{2mD}{\hbar^2} e^{-2ax} + \frac{4mD}{\hbar^2} e^{-ax} + \frac{2m(E-D)}{\hbar^2} \right] \psi(x) = 0. \quad (\text{A-6})$$

Fazendo uma mudança de variável da forma

$$y = ke^{-ax} \quad \left( k = \frac{2\sqrt{2mD}}{\hbar a} \right) \quad \text{e} \quad \beta^2 = -\frac{2m(E-D)}{\hbar^2 a^2} \quad (\text{A-7})$$

nota-se que é necessário calcular as derivadas de primeira e segunda ordem para que essa transição seja feita corretamente na equação A-6. Sendo assim é válido lembrar a regra de derivação para a função implícita, onde:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} &= \frac{d}{dx} \left( \frac{d}{dx} \right) = \frac{d}{dy} \frac{dy}{dx} \left( \frac{d}{dy} \frac{dy}{dx} \right) = \frac{dy}{dx} \left[ \frac{d}{dy} \left( \frac{d}{dy} \frac{dy}{dx} \right) \right] \\ &= \left( \frac{dy}{dx} \right)^2 \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d}{dy} \left[ \frac{d}{dy} \left( \frac{dy}{dx} \right) \right] \frac{dy}{dx}. \end{aligned} \quad (\text{A-8})$$

Calculando-se então adequadamente os membros da equação A-6 de forma que seja definida em termos de  $y$  tem-se:

$$\frac{dy}{dx} = -ake^{-ax} = -ay \Rightarrow \left( \frac{dy}{dx} \right)^2 = a^2 y^2 \quad (\text{A-9})$$

e

$$\frac{d}{dy} \left( \frac{dy}{dx} \right) = \frac{d}{dy} (-ay) = -a. \quad (\text{A-10})$$

Assim obtém-se

$$\frac{d^2}{dx^2} = a^2 y^2 \frac{d^2}{dy^2} + (-ay)(-a) \frac{d}{dy} = a^2 y^2 \frac{d^2}{dy^2} + a^2 y \frac{d}{dy}. \quad (\text{A-11})$$

Efetuando a mudança de variável nos outros membros da equação A-6 que independem das derivadas tem-se

$$-\frac{2mD}{\hbar^2} e^{-2ax} = -\frac{2mD}{\hbar^2} \frac{y^2}{k^2} = -\frac{2mDy^2}{\hbar^2 \left(4 \frac{2mD}{\hbar^2 a^2}\right)} = -a^2 \frac{y^2}{4} \quad (\text{A-12})$$

e também,

$$\frac{4mD}{\hbar^2} e^{-ax} = \frac{4mD}{\hbar^2} \frac{y}{k} = \frac{4mD}{\hbar^2} \frac{y}{\frac{2\sqrt{2mD}}{\hbar a}} = \frac{2mD\sqrt{2mD}y}{\frac{2mD}{a}\hbar} = a \underbrace{\frac{\sqrt{2mD}}{a\hbar}}_{k/2} ya = a^2 \frac{k}{2} y. \quad (\text{A-13})$$

Reescrevendo a equação A-6 sob a nova variável, tem-se que:

$$\left[ a^2 y^2 \frac{d^2}{dy^2} + a^2 y \frac{d}{dy} - a^2 \frac{y^2}{4} + a^2 \frac{k}{2} y - a^2 \beta^2 \right] \psi(y) = 0. \quad (\text{A-14})$$

Dividindo a equação por  $a^2$  tem-se:

$$\left[ y^2 \frac{d^2}{dy^2} + y \frac{d}{dy} - \frac{y^2}{4} + \frac{k}{2} y - \beta^2 \right] \psi(y) = 0. \quad (\text{A-15})$$

Tomando  $\psi(y) = y^A f(y)$ , sendo A uma constante, faz-se uma nova equação de tal forma que a nova função usada na equação seja  $f(y)$ . Para isso, mais uma vez é preciso calcular as derivadas de primeira e segunda ordem para esta função aparecer na equação sem que haja a participação da função  $\psi$ . Calculando então as derivadas,

$$\frac{d}{dy}(y^A f(y)) = Ay^{A-1} f(y) + y^A \frac{df}{dy}, \quad (\text{A-16})$$

$$\frac{d^2}{dy^2}(y^A f(y)) = \frac{d}{dy} \left( Ay^{A-1} f(y) + y^A \frac{df}{dy} \right) = A(A-1)y^{A-2} f(y) + 2Ay^{A-1} \frac{df}{dy} + y^A \frac{d^2 f}{dy^2}. \quad (\text{A-17})$$

Dessa maneira a equação A-15 pode ser dada (em função de  $f(y)$ ) por:

$$A(A-1)y^A f(y) + 2Ay^{A+1} \frac{df}{dy} + y^{A+2} \frac{d^2 f}{dy^2} + Ay^A f(y) + y^{A+1} \frac{df}{dy} - \frac{y^2}{4} y^A f(y) + \frac{k}{2} y^{A+1} f(y) - \beta^2 y^A f(y) = 0. \quad (\text{A-18})$$

Simplificando  $y^A$  da equação acima tem-se:

$$\left[ A(A-1) + 2Ay \frac{d}{dy} + y^2 \frac{d^2}{dy^2} + A + y \frac{d}{dy} - \frac{y^2}{4} + \frac{k}{2} y - \beta^2 \right] f(y) = 0, \quad (\text{A-19})$$

de forma mais adequada

$$\left[ y^2 \frac{d^2}{dy^2} + (2A+1)y \frac{d}{dy} - \frac{y^2}{4} + \frac{k}{2} y + A^2 - \beta^2 \right] f(y) = 0. \quad (\text{A-20})$$

Tem-se, dessa forma, uma equação diferencial de segunda ordem a ser resolvida. Lembrando que esta equação surgiu de algumas mudanças feitas na equação de Schrödinger e, sendo assim, deve-se ter cautela ao sugerir uma solução já que tal sugestão deverá respeitar os critérios da equação de onda inicial. Uma forma de se resolver tal equação é substituindo a função  $f(y)$  por uma série de potências. Ao observar os termos de mais baixa ordem e a necessidade de se manter a igualdade dada pela equação A-20, conclui-se que  $A^2 - \beta^2 = 0$ . Neste caso utiliza-se  $A = -\beta$ , o caso em que  $A = \beta$  não é interessante já que se isso ocorrer  $\psi(y)$  tende a ficar finito quando  $y \rightarrow \infty$ . Logo, podemos simplificar por  $y$  a equação anterior e obter a seguinte equação:

$$\left[ y \frac{d^2}{dy^2} - (2\beta-1) \frac{d}{dy} - \frac{y}{4} + \frac{k}{2} \right] f(y) = 0. \quad (\text{A-21})$$

Uma forma de tratar essa equação a fim de se obter uma solução analítica é usando a transformada de Laplace [20], definida como:

$$L \{f(y)\} = \int_0^\infty f(y) e^{-py} dy = F(p). \quad (\text{A-22})$$

Aplicando esta ferramenta matemática na equação A-21 tem-se:

$$L \left\{ \left( y \frac{d^2}{dy^2} - (2\beta - 1) \frac{d}{dy} - \frac{y}{4} + \frac{k}{2} \right) f(y) \right\} = 0. \quad (\text{A-23})$$

Por propriedades básicas de integração,

$$L \left\{ y \frac{d^2 f}{dy^2} \right\} - (2\beta - 1) L \left\{ \frac{df}{dy} \right\} - \frac{1}{4} L \{ y f(y) \} + \frac{k}{2} L \{ f(y) \} = 0. \quad (\text{A-24})$$

Resolvendo cada membro da equação acima separadamente tem-se que:

$$L \left\{ \frac{df}{dy} \right\} = \lim_{q \rightarrow \infty} \left\{ \int_0^q f'(y) e^{-py} dy \right\} = \lim_{q \rightarrow \infty} \left\{ e^{-py} f(y) \Big|_0^q + \int_0^q f(y) e^{-py} dy \right\} = pF(p), \quad (\text{A-25})$$

$$L \{ y f(y) \} =$$

$$\int_0^\infty y f(y) e^{-py} dy = - \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial p} e^{-py} f(y) dy = - \frac{d}{dp} \int_0^\infty f(y) e^{-py} dy = -F'(p), \quad (\text{A-26})$$

$$\begin{aligned} L \left\{ y \frac{d^2 f}{dy^2} \right\} &= \int_0^\infty y f''(y) e^{-py} dy \\ &= \lim_{q \rightarrow \infty} \left\{ y e^{-py} f'(y) \Big|_0^q - \int_0^q f'(y) (1 - py) e^{-py} dy \right\} \\ &= \lim_{q \rightarrow \infty} \left\{ p \int_0^q y f'(y) e^{-py} dy - \underbrace{\int_0^q f'(y) e^{-py} dy}_{pF(p)} \right\} \\ &= \lim_{q \rightarrow \infty} \left\{ p^2 \underbrace{\int_0^q y f(y) e^{-py} dy}_{-F'(p)} - p \underbrace{\int_0^q f(y) e^{-py} dy}_{F(p)} \right\} - pF(p) \\ &= p^2 F'(p) - 2pF(p). \end{aligned} \quad (\text{A-27})$$

Reescrevendo a equação (A-24) com os resultados obtidos acima tem-se:

$$-p^2 F'(p) - 2pF(p) - (2\beta - 1)pF(p) + \frac{1}{4} F'(p) + \frac{k}{2} F(p) = 0. \quad (\text{A-28})$$

Multiplicando a equação por  $(-1)$  e reagrupando adequadamente os termos da equação acima ficam:

$$\left(p^2 - \frac{1}{4}\right) F'(p) + \left[(2\beta + 1)p - \frac{k}{2}\right] F(p) = 0. \quad (\text{A-29})$$

Desta forma, o problema de se resolver uma equação diferencial de segunda ordem torna-se um problema de primeira ordem. Portanto, o próximo passo consiste em encontrar a solução para esta nova equação. Para facilitar os cálculos e também a sua visualização faz-se a seguinte manipulação algébrica na equação (A-29):

$$\frac{F'(p)}{F(p)} = \frac{[k/2 - (2\beta + 1)p]}{(p^2 - 1/4)}, \quad (\text{A-30})$$

$$\frac{dF/dp}{F} = \frac{[k/2 - (2\beta + 1)p]}{(p^2 - 1/4)}, \quad (\text{A-31})$$

$$\int \frac{dF}{F} = \int \frac{[k/2 - (2\beta + 1)p]}{(p^2 - 1/4)} dp, \quad (\text{A-32})$$

$$\ln F = \underbrace{\int \frac{k/2}{(p^2 - 1/4)} dp}_{\{a\}} + \underbrace{\int \frac{-(2\beta + 1)p}{(p^2 - 1/4)} dp}_{\{b\}} + c. \quad (\text{A-33})$$

Resolvendo  $\{a\}$  tem-se que:

$$\int \frac{k/2}{(p^2 - 1/4)} dp = \frac{k}{2} \int \left( \frac{A}{(p + 1/2)} + \frac{B}{(p - 1/2)} \right) dp = \frac{k}{2} \ln(p - 1/2) - \frac{k}{2} \ln(p + 1/2), \quad (\text{A-34})$$

e  $\{b\}$ ,

$$\int \frac{-(2\beta + 1)p}{(p^2 - 1/4)} dp = -(2\beta + 1) \int \frac{p}{((p^2 - 1/4))} dp = -\frac{(2\beta + 1)}{2} \ln(p^2 - 1/4). \quad (\text{A-35})$$

Voltando na equação A-33 tem-se que:

$$\begin{aligned} \ln F &= \frac{k}{2} \ln(p - 1/2) - \frac{k}{2} \ln(p + 1/2) - \frac{(2\beta + 1)}{2} \ln(p^2 - 1/4) + c \\ &= \ln(p - 1/2)^{\frac{k}{2}} - \ln(p + 1/2)^{\frac{k}{2}} + \ln(p^2 - 1/4)^{-\frac{(2\beta+1)}{2}} + \ln C \\ &= \ln \left[ \left( \frac{p - 1/2}{p + 1/2} \right)^{\frac{k}{2}} (p^2 - 1/4)^{-\frac{(2\beta+1)}{2}} C \right]. \end{aligned} \quad (\text{A-36})$$

Daí

$$F = \left[ \left( \frac{p - \frac{1}{2}}{p + \frac{1}{2}} \right)^{\frac{k}{2}} \left( p^2 - \frac{1}{2} \right)^{-\frac{(2\beta+1)}{2}} \right] C = \left\{ \left( \frac{p - \frac{1}{2}}{p + \frac{1}{2}} \right)^{\frac{k}{2}} \left[ \left( p - \frac{1}{2} \right) \left( p + \frac{1}{2} \right) \frac{\left( p + \frac{1}{2} \right)}{\left( p + \frac{1}{2} \right)} \right]^{-\frac{(2\beta+1)}{2}} \right\} C \quad (\text{A-37})$$

Pode-se concluir então que

$$F = C \left( p + \frac{1}{2} \right)^{-(2\beta+1)} \left( 1 - \frac{1}{p + 1/2} \right)^{\frac{k-(2\beta+1)}{2}}. \quad (\text{A-38})$$

dados que C é a constante pendente da integração. Nota-se que  $\left( 1 - \frac{1}{p+1/2} \right)^{\frac{k-(2\beta+1)}{2}}$  é chamada função multi-valorada e o foco deste estudo - as funções de onda - trabalha com funções de valor único. Assim, tomando

$$k - (2\beta + 1) = 2n, \quad n = 0, 1, 2, 3... \quad (\text{A-39})$$

E expandindo a equação A-38 em série, tem-se:

$$F(p) = C' \sum_{j=0}^n \frac{(-1)^j n! \left( p + \frac{1}{2} \right)^{-(2\beta+j+1)}}{(n-j)! j!}, \quad (\text{A-40})$$

onde  $C'$  é um valor constante. Com a função escrita dessa forma é possível aplicar a transformada de Laplace inversa afim de obter o resultado de  $f(y)$ . Usando esta ferramenta, e de acordo com o cálculo tabelado [21], fórmula (29.3.10) tem-se que:

$$f(y) = C'' y^{2\beta} e^{-y/2} \sum_{j=0}^n \frac{(-1)^j n! \Gamma(2\beta + 1)}{(n-j)! j! \Gamma(2\beta + j + 1)} y^j, \quad (\text{A-41})$$

tal que  $C''$  é uma constante.

Sabendo que a série de expansão da função hipergeométrica confluyente é:

$$F(-n, \gamma, y) = \sum_{j=0}^n \frac{(-1)^j n! \Gamma(\gamma)}{(n-j)! j! \Gamma(\gamma + j)} y^j, \quad (\text{A-42})$$

tem-se que

$$f(y) = C'' y^{2\beta} e^{-y/2} F(-n, 2\beta + 1, y), \quad (\text{A-43})$$

e como  $\psi(y) = y^A f(y)$  com  $A = -\beta$  então,

$$\psi(y) = C'' y^\beta e^{-y/2} F(-n, 2\beta + 1, y). \quad (\text{A-44})$$

Levando em conta que a relação entre a função hipergeométrica confluyente e os polinômios generalizados de Laguerre é

$$F(-m, u + 1, y) = m! \frac{\Gamma(u + 1)}{\Gamma(u + m + 1)} L_m^u(z), \quad (\text{A-45})$$

define-se a função de onda em termos dos polinômios de Laguerre de tal forma que:

$$\psi(y) = C_n y^{\frac{k}{2} - (n + \frac{1}{2})} e^{-y/2} L_n^{(k-2n-1)}(y), \quad (\text{A-46})$$

onde  $C_n$  é a constante de normalização da função de onda. Fazendo os cálculos necessários, ou seja, aplicando normalização da função de onda

$$\int_0^\infty \psi^*(y) \psi(y) dy = 1, \quad (\text{A-47})$$

tem-se que

$$C_n = \left[ \frac{an!(k - 2n - 1)}{\Gamma(k - n)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (\text{A-48})$$

Sendo assim, os níveis de energia são dados a partir das equações A-7 e A-39, onde

$$k - (2\beta + 1) = 2n \Rightarrow -\beta = \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{\overbrace{\sqrt{2mD}}^k}{\hbar a}. \quad (\text{A-49})$$

Logo,

$$\beta^2 = \left[ \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{\sqrt{2mD}}{\hbar a} \right]^2 \Rightarrow \frac{-2m(E_n - D)}{\hbar^2 a^2} = \left[ \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{\sqrt{2mD}}{\hbar a} \right]^2. \quad (\text{A-50})$$

Portanto,

$$E_n = D - \frac{\hbar^2 a^2}{2m} \left[ \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{\sqrt{2mD}}{\hbar a} \right]^2. \quad (\text{A-51})$$

Os resultados obtidos para as funções de onda A-46 e autovalor de energia A-51 são os mesmos encontrados na literatura [22].

# Apêndice B

## Método de Integração aplicado na solução da Equação de Movimento

### Resolução da Equação (3.9)

A solução da equação (3.9) depende do coeficiente de  $y^2$  que está dentro da raiz quadrada no denominador do integrando, isto é, de acordo com o valor dado a  $\epsilon$  encontram-se soluções diferentes para tal equação. Como já foi visto na equação (3.5) para o potencial de Morse (que corresponde a  $\alpha = 0$ ) o valor de  $\epsilon$  depende diretamente do valor da energia  $E$  e, portanto, as soluções serão calculadas separadamente de tal forma que seja dada uma solução para o caso em que a energia é negativa ( $\epsilon < 0$ ), outra solução para quando a energia for zero ( $\epsilon = 0$ ) e, finalmente, para quando a energia for positiva ( $\epsilon > 0$ ). Nos outros casos do potencial generalizado a resolução da integral ocorre de forma análoga.

Antes de realizar-se o processo de integração da equação (3.9) é necessário uma pequena adequação dos parâmetros envolvidos de tal forma que:

$$\int_{y_i}^y \frac{dy}{\sqrt{\frac{E}{D}y^2 + 2y - 1}} = \omega_0(t - t_i), \quad (\text{B-1})$$

$$\text{tal que } \omega_0 = \sqrt{\frac{2Da^2}{m}}.$$

### Caso em que $E = 0$

O primeiro caso a ser tratado corresponde a  $E = 0$ . Sem o termo de  $y^2$ , a resolução da integral é feita de forma bem simples. Fazendo uma substituição de variável  $(2y - 1) = u$ , e integrando (equação B-1), facilmente chega-se ao seguinte resultado:

$$x(t) = \frac{1}{a} \ln \left( \frac{1 + \omega_0^2(t - t'_i)^2}{2} \right), \quad (\text{B-2})$$

onde  $t'_i = t_i - \frac{(2y_i - 1)^{\frac{1}{2}}}{\omega_0}$ .

### Caso em que $E > 0$

No segundo caso, que trabalha com valores positivos da energia, a resolução da equação (B-1) torna-se um pouco mais complexa, já que o polinômio que está dentro da raiz quadrada no denominador do integrando dessa equação torna-se agora um polinômio de segundo grau.

Para resolver a integral da equação (B-1), o polinômio de segunda ordem presente dentro da raiz quadrada do denominador do integrando deve ser reescrito na forma:  $(y - y_1)(y - y_2)$ , onde  $y_1$  e  $y_2$  são as raízes desse polinômio, i.e., neste caso:

$$y_1 = -\frac{D}{E} + \frac{D}{E} \sqrt{\frac{D+E}{D}} \quad \text{e} \quad y_2 = -\frac{D}{E} - \frac{D}{E} \sqrt{\frac{D+E}{D}}. \quad (\text{B-3})$$

Fazendo alguns ajustes e aplicando a técnica de integração por frações parciais a equação (B-1) pode ser reescrita como:

$$\frac{1}{(y_1 - y_2)} \int_{y_i}^y \left( \frac{y - y_2}{y - y_1} \right)^{\frac{1}{2}} dy - \frac{1}{(y_1 - y_2)} \int_{y_i}^y \left( \frac{y - y_1}{y - y_2} \right)^{\frac{1}{2}} dy = \gamma(t - t_i) \quad (\text{B-4})$$

dado que  $\gamma = \left( \frac{E}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \omega_0$ .

Para se resolver as duas integrais da equação (B-4) foram feitas três mudanças de variáveis procedendo-se da seguinte maneira: inicialmente tomando  $\omega^2 = y - y_2$ . E então

tem-se que:

$$\frac{2}{(y_1 - y_2)} \int \frac{\omega^2}{(\omega^2 + y_2 - y_1)^{\frac{1}{2}}} d\omega - \frac{2}{(y_1 - y_2)} \int (\omega^2 + y_2 - y_1)^{\frac{1}{2}} d\omega = \gamma(t - t_i). \quad (\text{B-5})$$

Depois adotando a mudança de variável  $z^2 = \frac{\omega^2}{y_1 - y_2}$  tem-se

$$2 \int \frac{z^2}{(z^2 - 1)^{\frac{1}{2}}} dz - 2 \int (z^2 - 1)^{\frac{1}{2}} dz = \gamma(t - t_i). \quad (\text{B-6})$$

Para finalizar a integração, após a mudança de variável  $\theta = \text{arccosh}(z)$ , a equação (B-6) é dada por:

$$2 \left( \int \frac{\cosh(2\theta) + 1}{2} d\theta - \int \frac{\cosh(2\theta) - 1}{2} d\theta \right) = \gamma(t - t_i), \quad (\text{B-7})$$

ou seja

$$2\theta = \gamma(t - t_i). \quad (\text{B-8})$$

Assim, a equação (B-4) é reescrita da seguinte forma:

$$\text{arccosh} \left[ \left( \frac{y - y_2}{y_1 - y_2} \right)^{\frac{1}{2}} \right] = \left( \frac{E}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\omega_0}{2} (t - t'_i), \quad (\text{B-9})$$

onde  $t'_i = t_i - \frac{2}{\left(\frac{E}{D}\right)^{\frac{1}{2}} \omega_0} \text{arccosh} \left[ \left( \frac{y_i - y_2}{y_1 - y_2} \right)^{\frac{1}{2}} \right]$ .

Rearranjando a equação (B-9) obtém-se a expressão:

$$y = y_2 + (y_1 - y_2) \cosh^2 \left[ \left( \frac{E}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\omega_0}{2} (t - t'_i) \right]. \quad (\text{B-10})$$

Utilizando a relação  $\cosh^2(a) = \frac{\cosh(2a) + 1}{2}$  tem-se que:

$$y = y_2 + \frac{(y_1 - y_2)}{2} + \frac{(y_1 - y_2)}{2} \cosh \left[ \left( \frac{E}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \omega_0 (t - t'_i) \right]. \quad (\text{B-11})$$

Substituindo os valores de  $y_1$  e  $y_2$  (equação (B-3)) e o valor de  $y = e^{ax}$  na equação

(B-11), após algumas manipulações algébricas, o resultado é dado por:

$$x(t) = \frac{1}{a} \ln \left( \frac{D \left( \sqrt{\frac{E+D}{D}} \cosh \left[ \left( \frac{E}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \omega_0 (t - t'_i) \right] - 1 \right)}{E} \right). \quad (\text{B-12})$$

### Caso em que $E < 0$

Já o procedimento completo para resolver a equação (B-1) quando a energia for negativa ( $\epsilon < 0$ ) é feito reescrevendo esta equação considerando os valores de energia negativos.

Partindo desta equação e trabalhando com os valores de energia negativos, desta forma, tem-se

$$\int_{y_i}^y \frac{dy}{(y^2 - 2\frac{D}{|E|}y + \frac{D}{|E|})^{1/2}} = i\lambda(t - t_i), \quad (\text{B-13})$$

tal que  $\lambda = \left( -\frac{|E|}{D} \right)^{1/2} \omega_0$ .

Da mesma forma que foi mostrada para o caso anterior, a equação (B-13) pode ser reescrita usando o método de frações parciais, ou seja:

$$\frac{1}{(y_1 - y_2)} \int_{y_i}^y \left( \frac{y - y_2}{y - y_1} \right)^{\frac{1}{2}} dy - \frac{1}{(y_1 - y_2)} \int_{y_i}^y \left( \frac{y - y_1}{y - y_2} \right)^{\frac{1}{2}} dy = i\lambda(t - t_i). \quad (\text{B-14})$$

sendo  $y_1$  e  $y_2$  as raízes do polinômio presente no denominador da integral da equação (B-13), que nesse caso vale

$$y_1 = \frac{D}{|E|} + \frac{D}{|E|} \sqrt{\frac{D+E}{D}} \quad \text{e} \quad y_2 = \frac{D}{|E|} - \frac{D}{|E|} \sqrt{\frac{D+E}{D}}. \quad (\text{B-15})$$

Na equação (B-14) fazendo-se a primeira mudança de variável  $\omega^2 = y_1 - y$  tem-se que:

$$\frac{2}{i(y_1 - y_2)} \int (\omega^2 + y_1 - y_2)^{\frac{1}{2}} d\omega - \frac{2i}{(y_1 - y_2)} \int \frac{\omega^2}{(y_1 - y_2 - \omega^2)^{\frac{1}{2}}} d\omega = i\lambda(t - t_i) \quad (\text{B-16})$$

e, após a segunda mudança de variável  $z^2 = \frac{\omega^2}{y_1 - y_2}$ ,

$$-\frac{2}{i} \int (1 - z^2)^{\frac{1}{2}} dz - 2i \int \frac{z^2}{(1 - z^2)^{\frac{1}{2}}} dz = i\lambda(t - t_i). \quad (\text{B-17})$$

Encerrando as mudanças de variáveis com  $z = \cos(\theta)$  tem-se que:

$$\frac{2}{i} \int \frac{1 - \cos(2\theta)}{2} d\theta - \frac{2}{i} \int \frac{1 + \cos(2\theta)}{2} d\theta = i\lambda(t - t_i). \quad (\text{B-18})$$

ou seja,

$$\frac{2}{i} \theta = i\lambda(t - t_i). \quad (\text{B-19})$$

Retornando as mudanças feitas para a variável  $y$  tem-se como resultado que

$$\arccos \left[ \left( \frac{y_1 - y}{(y_1 - y_2)} \right)^{\frac{1}{2}} \right] = -\frac{1}{2} \left( \frac{-E}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \omega_0(t - t'_i). \quad (\text{B-20})$$

tal que  $t'_i = t_i + \frac{2}{\left(\frac{-E}{D}\right)^{\frac{1}{2}} \omega_0} \arccos \left[ \left( \frac{y_1 - y_i}{(y_1 - y_2)} \right)^{\frac{1}{2}} \right]$ .

Logo, a solução indicada na equação (B-20) pode ser reescrita como:

$$y = y_1 - (y_1 - y_2) \cos^2 \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{-E}{D} \right)^{1/2} \omega_0(t - t'_i) \right]. \quad (\text{B-21})$$

E então, tem-se

$$y = y_1 - \frac{(y_1 - y_2)}{2} - \frac{(y_1 - y_2)}{2} \cos \left[ \left( \frac{-E}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \omega_0(t - t'_i) \right]. \quad (\text{B-22})$$

Substituindo os valores de  $y_1$  e  $y_2$  dados pelas expressões em (B-15) e o valor de  $y = e^{ax}$  chega-se ao seguinte resultado para equação de movimento:

$$x(t) = \frac{1}{a} \ln \left( \frac{D \left( 1 - \sqrt{\frac{E+D}{D}} \cos \left[ \left( \frac{-D}{E} \right)^{\frac{1}{2}} \omega_0(t - t'_i) \right] \right)}{(-E)} \right). \quad (\text{B-23})$$

# Apêndice C

## Aplicações possíveis deste trabalho no Ensino Médio

A abordagem das leis de Newton no Ensino Médio é bastante rica, tanto do ponto de vista teórico quanto experimental. Os conceitos discutidos neste trabalho são de conhecimento específico dessas leis, porém serve como um ótimo exemplo aonde utiliza-se das leis da Mecânica Clássica e também da Mecânica Quântica, já que o potencial de Morse, como fora dito no corpo do trabalho, possui aplicações em ambos os casos.

Analisando este contexto, a análise da Energia Potencial (ou mesmo, Potencial) serve como um elo entre esses temas (Clássico/Quântico) e que pode ser explorado através da discussão sobre a influência dessa Energia em sistemas específicos. Esse pode ser um método interessante para se abordar a Mecânica Quântica, talvez evitando a grande dificuldade sobre a Física Moderna.

Além disso, pode-se aproveitar ainda mais dessa manipulação de ferramentas algébricas para trabalhar com os estudantes um pouco da Física Teórica, outro parte que os estudantes de nível médio têm muito receio em abordar. Em princípio, a idéia de se encontrar uma solução de uma equação de movimento parece muito complicada e sem sentido. Afinal, o que é necessário descobrir? É uma pergunta frequentemente adotada pelos alunos. Podemos dar vários motivos para se obter tal resultado. Um deles é prever em que situações uma partícula sujeita a esse potencial terá uma determinada quantidade de energia suficiente para manter

seu movimento. É necessário alguns cálculos, talvez até simples. Isso mostra também a necessidade de dedicação, esforço e concentração que são necessários para o desenvolvimento deste tipo de problema.

Outro aspecto a ser apresentado neste trabalho é entender o que significa Energia Potencial. Ela comporta-se sempre assim? Existe outros tipos de Energia? Aonde encontramos este tipo de Energia? Será útil no meu dia-a-dia estudar esses fenômenos? Fica claro que dúvidas e curiosidades são dois fatores de grande motivação, não somente dos alunos mas também de qualquer trabalho científico a ser desenvolvido. Assim, é possível trabalhar com uma grande quantidade de questões a respeito do assunto. Esse é o propósito dos educadores: cativar e provocar a curiosidade sobre o método científico nos alunos.

O uso deste trabalho para aplicações em sala de aula pode ser feito de várias maneiras: debates, palestras, seminários, pesquisa bibliográfica, etc. Artigos de revistas, jornais, artigos científicos e não-científicos, entre outros, podem fornecer material informativo sobre esse assunto enriquecendo discussões.

Uma outra forma de abordar o assunto é da forma mais apreciada pelos alunos: aulas experimentais. Esta foi uma maneira utilizada para introduzir, de forma bem simples, o que se entende por energia. Com alguns experimentos como o “Looping” demonstrando a energia potencial gravitacional, o gerador de Van De Graaf que demonstra a presença da energia potencial eletrostática, vê-se a energia de várias formas. No entanto, realizar aulas experimentais para uma grande quantidade de alunos de uma só vez, não é uma tarefa fácil. Isto requer um número suficiente de equipamentos e pessoal capacitado para aplicá-las. Uma das dificuldades é a falta de material necessário para a demonstração, que geralmente tem um ou outro equipamento danificado após a experiência, o que é comum.

Nos últimos anos, o ensino básico público da região recebeu um apoio maior do ensino superior com o projeto de extensão universitária da UNESP(Câmpus de São José do Rio Preto) sob responsabilidade do Prof. Dr. Elso Drigo Filho com um método simples e claro de aplicar estes conhecimentos com os alunos. Através de materiais de baixo custo para construir os equipamentos e colocando alunos de graduação para apoiarem os professores

durante as experiências possibilitou a realização dessas aulas, que ocorreram com grande sucesso, minimizando as dificuldades e imprevistos. Alguns motivos que contribuíram para essa idéia dar certo foram: (1) os alunos de graduação que monitoraram a experiência permitiam que os alunos de nível médio se dedicassem efetivamente ao experimento, (2) o material não seria tão facilmente fornecido e montado sem a supervisão e montagem por parte dos graduandos, (3) a prática da ciência é infinitamente mais prazerosas para os alunos do que as aulas teóricas, enfim, inúmeros fatores positivos influenciaram na aplicação do projeto como forma de visualização dos resultados envolvendo conceitos de energia.

Durante o desenvolvimento deste trabalho, a idéia do projeto da UNESP foi colocada em prática, com o apoio dos graduandos, na Escola Estadual “Professor José Carlos da Silva”, localizada na cidade de Barbosa (a 80km de S.J. Rio Preto) com alunos de todas as idades, mostrando que a ciência é um conceito de fácil entendimento para qualquer pessoa. A seguir são mostradas fotos dessas atividades.



Foto 1: Início da apresentação feita na EE Prof José Carlos da Silva - primeira contato com os alunos foi através da análise da quantidade de movimento. Todo o procedimento e provocação junto aos alunos ocorreu por parte do graduando da UNESP, que executou boa parte das explicações e discussões com os alunos neste experimento. Ao fundo merece destacar a presença do ATP João dos Santos

Muitos outros trabalhos foram feitos em escolas da região em torno de São José do Rio Preto, entretanto, esta escola destaca-se por ser a unidade sede do autor deste trabalho que realizou boa parte deste trabalho em conjunto com os graduandos da UNESP, além de ter contado com a presença de representantes da Diretoria de Ensino de Birigui, os professores João Santos e Reynaldo Maua Junior (ATP de Matemática e Supervisor responsável pela unidade, respectivamente).



Foto 2: Após uma explicação do funcionamento dos experimentos deu-se aos alunos um tempo para aproveitarem da curiosidade e utilizar os experimentos, realizando integralmente todos os passos procedimentais em todos os equipamentos. Aqui é mostrado uma experiência de eletricidade onde o suspense em tocar um modelo da garrafa de Leyden era uma emoção. Logo queriam repetir, demonstrando o prazer em estar envolvido com a ciência.

Para apresentar estes trabalhos junto a outros professores da rede pública realizou-se uma Orientação Técnica para professores de Física e Ciências, para também divulgar a forma com que se vem trabalhando aulas práticas com materiais de baixo custo. Todos professores mostraram-se muito contentes com a proposta e até pediram que mais atividades fossem apresentadas, demonstrando interesse em aplicá-las.



Foto 3: Uma amostra de um exemplo de aplicação do trabalho desenvolvido nesta dissertação: estudo da Energia Potencial. Neste caso tratava-se de um tipo de energia bastante comum, a Energia Potencial Gravitacional. Interessante observar a participação dos alunos, todos bastante envolvidos com o assunto.

Com todo esse trabalho, nota-se que a ciência ainda deve ser muito valorizada e muitíssimo aplicada na escola. O mercado de trabalho, a cada dia que passa, procura por mais cientistas e além disso, pessoas com criatividade e raciocínio, elementos basicamente fornecidos, de forma implícita, pelo trabalho com a ciência. Acredita-se que tem-se muito trabalho pela frente e este foi um passo relativamente importante para a evolução do estudo da Física e porque não da Ciência como um todo.



Foto 4: Aluno testando o momento angular, quando muda a posição dos pesos em suas mãos percebeu nitidamente a sua influência em sua velocidade. Contexto que os alunos acharam muito divertido.

Uma vez que esta dissertação trata de conceitos de energia, procurou-se aplicar tais conceitos em sala de aula. Neste apêndice ficou evidente que as experiências trabalhadas na escola exemplificam muito bem a importância de se discutir com os estudantes sobre energia, suas formas, propriedades, necessidades, dentre outras coisas. Além disso, o método aplicado obteve um resultado satisfatório, onde percebeu-se a vontade dos alunos em experimentar mais, mesmo após o término da aula. Isso incentiva bastante a dar prosseguimento neste trabalho.

# Referências Bibliográficas

- [1] P. M. Morse. Diatomic Molecules According To The Wave Mechanics. II. Vibrational Levels. *Phys. Rev.*, 34:57–64, 1929.
- [2] C. Berkdemir. Pseudospin symmetry in the relativistic Morse potential including the spin-orbit coupling term. *Nuclear Physics A*, 770 (1–2):32–39, 2006.
- [3] J. Henkel; M. Holthaus. Classical Resonances in Quantum Mechanics. *Phys. Rev. A*, 45 (3):1978–1986, 1992.
- [4] W.C. DeMarcus. Classical motion of a Morse oscillator. *Am. J. Phys.*, 46(7):733, 1978.
- [5] M. Peyrard. Nonlinear dynamics and statistical physics of DNA. *Nonlinearity*, 17 (2):R1–R40, 2004.
- [6] M. Techera; L. L. Daemen; E.W. Prohofsky. Nonlinear model of the DNA molecule. *Phys. Rev. A*, 40 (11):6636–6642, 1989.
- [7] D. Voet and J. Voet. *Biochemistry*. John Wiley & Sons, New York, 1990.
- [8] G.P. Spada V. Castelletto; R. Itri; L.Q. Amaral. Small–Angle X–Ray Scattering of DNA Fragments – Form and Interference Factors. *Macromolecules*, 28 (24):8395, 1995.
- [9] M.G.D. Nix; A.L. Devine; B. Cronin;M.N.R. Ashfold. Ultraviolet photolysis of adenine: Dissociation via the (1)pi sigma(\*) state. *J. Chem. Phys.*, 126 (12):124312–1–124312–10, 2007.
- [10] S. Boydston-White; T.Gopen; S.Houser; J. Bargonetti; M. Diem. Infrared spectroscopy of human tissue. V. Infrared spectroscopic studies of myeloid leukemia (ML-1) cells at different phases of the cell cycle. *Biospectroscopy*, 5 (4):219–227, 1999.

- [11] A. Vermeulen; H.J. Zhou; A. Pardi. Determining DNA global structure and DNA bending by application of NMR residual dipolar couplings. *J. Am. Chem. Soc.*, 122 (40):9638–9647, 2000.
- [12] E. Nir; K. Kleinermand; M.S. de Vries. Pairing of isolated nucleic-acid bases in the absence of the DNA backbone. *Nature*, 408 (6815):949–951, 2000.
- [13] M. Peyrard; A. R. Bishop. Statistical Mechanics of a Nonlinear Model for DNA Denaturation. *Physical Review Letters*, 62 (23):2755–2758, 1989.
- [14] T. L. Chow. *Classical Mechanics*. John Wiley and Sons, Inc., USA, reprinted edition, 1995.
- [15] H. Moisés Nussenzveig. *Curso de Física básica 1*. Edgard Blücher, Brazil, 4th edition, 2002.
- [16] K. Watari. *Mecânica Clássica*, volume I. Editora Livraria da Física, São Paulo, 2001.
- [17] S. T. Thornton and J. B. Marion. *Classical Dynamics of Particles and Systems*. Thomson Brooks/Cole, New York, fifth edition, 2004.
- [18] J. V. José and E. J. Saletan. *Classical dynamics: a contemporary approach*. Cambridge University Press, New York, reprinted edition, 1998.
- [19] F. L. Moraes Barboza; A. J. Costa; N. F. Ribeiro ; E. Drigo Filho. Solução Analítica do Potencial de Morse Clássico. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, (em prelo).
- [20] G. Chen. The exact solutions of the Schrödinger equation with the Morse potential via Laplace transforms. *Physics Letters A*, 326:55–57, May 2004.
- [21] M. Abramowitz and I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover Publications, Inc., New York, NY, 1964.
- [22] Michael Martin Nieto and L. M. Simmons. Eigenstates, coherent states, and uncertainty products for the morse oscillator. *Phys. Rev. A*, 19(2):438–444, Feb 1979.