

Solução analítica do potencial de Morse em mecânica clássica

(Analytical solution of the Morse potential in classical mechanics)

F.L. Moraes Barboza^{1,2}, A.J. Costa¹, N.F. Ribeiro¹ e E. Drigo Filho¹

¹Departamento de Física, Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas, Universidade Estadual Paulista, São José do Rio Preto, SP, Brasil

²Escola Estadual “Professor José Carlos da Silva”, Barbosa, SP, Brasil

Recebido em 14/2/2007; Aceito em 9/4/2007

Usualmente o potencial de Morse é estudado em contextos de mecânica quântica. Por outro lado, ele é relativamente pouco aplicado em problemas clássicos. Neste trabalho uma solução completa é encontrada para as equações de movimento clássicas para uma partícula submetida a esse potencial. Exemplos numéricos são apresentados para alguns valores fixos dos parâmetros.

Palavras-chave: mecânica clássica, potencial de Morse, equação de movimento.

Usually the Morse potential is studied in the quantum mechanics context. On the other hand, there are relatively few applications for classical problems. In this work, a complete solution for the classical equation of motion is found for a particle subject to this potential. Numerical examples are presented for a fixed set of parameters.

Keywords: classical mechanics, Morse potential, motion equation.

1. Introdução

O potencial de Morse foi introduzido em 1929 para tratar vibrações em moléculas diatômicas [1]. Desde então esse potencial tem sido amplamente usado em física molecular, tendo papel importante na descrição de modos vibracionais moleculares (vide, por exemplo, Ref. [2]). Muito trabalho tem sido dedicado ao estudo desse potencial, como exemplo pode-se lembrar resultados numéricos [3], algébricos [4] e envolvendo sistemas confinados [5].

Apesar de inúmeros trabalhos usando o potencial de Morse no contexto da mecânica quântica, são bem mais raros os estudos envolvendo as equações de movimento clássicas [6,7]. Recentemente, o interesse pelo tratamento clássico desse potencial tem aumentado bastante, em particular, devido a ele ser usado para simular as interações de ponte de hidrogênio em modelos mecânicos do DNA. Essa abordagem, proposta inicialmente no final da década de 1980 [8,9], tem sido muito utilizada desde então. Para uma revisão recente veja a Ref. [10].

Um olhar cuidadoso na equação diferencial clássica que descreve uma partícula sujeita ao potencial de Morse mostra sua semelhança com a equação de Poisson-Boltzmann, quando usada para descrever íons em solução sujeitos a um potencial eletrostático gerado

por uma distribuição planar de cargas [11]. Essa segunda equação pode ser resolvida por integração direta. Conseqüentemente espera-se que a equação de movimento para o potencial de Morse também possa ser obtida dessa forma. Essa abordagem é o tópico principal deste artigo. O resultado apresentado na literatura [6] introduz um parâmetro, relacionado com a energia total do sistema e a profundidade do poço do potencial, o que torna a aplicação das condições iniciais muito penosa. O caminho proposto nesse trabalho, além de ser mais direto, permite identificar melhor a aplicação dessas condições.

2. A equação de movimento para o potencial de Morse

Através do princípio fundamental da dinâmica, é possível determinar a equação de movimento de uma partícula tratando teoricamente algumas equações de forma bastante simples. O potencial a ser tratado aqui é o de Morse [1] e é definido pela seguinte expressão:

$$V_M(x) = D(1 - e^{-a(x-x_0)})^2 - D \quad (1)$$

em que D e a são parâmetros relacionados, respectivamente, com a profundidade e largura do poço de potencial e x_0 representa o ponto no eixo x onde o potencial

¹E-mail: elso@ibilce.unesp.br.

tem o seu menor valor. A Fig. 1 mostra um exemplo da forma geral do potencial para um conjunto específico de parâmetros.

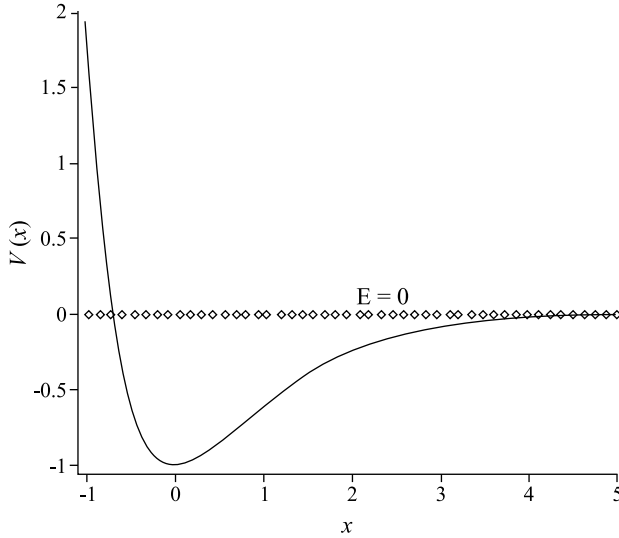


Figura 1 - Gráfico de $V_M(x)$, com $x_0 = 0$, $D = 1$ e $a = 1$.

Uma maneira de resolver o problema mecânico para o potencial em questão consiste em tratar a equação de movimento trabalhando com uma variável acoplada ao valor da energia [6]. Esse processo introduz artificialmente um parâmetro extra $\rho = (E + D)/D$, relacionado com a energia total do sistema E e com a profundidade do potencial D . Esse método de solução se mostra eficaz, embora mascare o uso das condições iniciais. Uma maneira de contornar esse problema é realizar uma integração direta das equações de movimento a partir da segunda lei de Newton.

3. Solução analítica utilizando integração direta

A partir do potencial (1) é possível calcular a força F atuante no sistema derivando-o com respeito a posição, ou seja,

$$\begin{aligned} F &= -\frac{dV_M(x)}{dx} = -\frac{d}{dx}(D(1 - e^{-a(x-x_0)})^2 - D) \\ &= -2Da(e^{-a(x-x_0)} - e^{-2a(x-x_0)}) \\ &= -2Da \sum_{n=1}^2 (-1)^n e^{-a(3-n)(x-x_0)}. \end{aligned} \quad (2)$$

Dessa forma, a equação do movimento para uma partícula sujeita ao potencial de Morse (1) pode ser obtida pela segunda lei de Newton chegando a seguinte equação:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \sum_{n=1}^2 \frac{\alpha}{2} (-1)^n e^{-a(3-n)(x-x_0)} = 0, \quad (3)$$

onde $\alpha = \frac{4Da}{m}$.

Uma rápida inspeção mostra que a Eq. (3) pode ser reescrita na forma

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - \sum_{n=1}^2 \frac{\alpha(-1)^n}{2(3-n)a} e^{-a(3-n)(x-x_0)} \right] = 0. \quad (4)$$

Sendo assim, uma primeira integração pode ser facilmente realizada conduzindo a

$$\left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - \sum_{n=1}^2 \frac{\alpha(-1)^n}{(3-n)a} e^{-a(3-n)(x-x_0)} = \epsilon, \quad (5)$$

onde ϵ é uma constante de integração e pode ser relacionada diretamente com a energia do sistema

$$E = \frac{m}{2} \epsilon. \quad (6)$$

Essa relação pode ser obtida lembrando que a energia total do sistema é dada pela soma da energia cinética com a potencial e usando a Eq. (5). Reescrevendo a Eq. (5) obtém-se

$$\begin{aligned} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 &= \epsilon + \sum_{n=1}^2 \frac{\alpha(-1)^n}{(3-n)a} e^{-a(3-n)(x-x_0)} \\ &= \epsilon - \frac{\alpha}{2a} e^{-2a(x-x_0)} + \frac{\alpha}{a} e^{-a(x-x_0)}. \end{aligned} \quad (7)$$

Fazendo um tratamento algébrico dessa equação e introduzindo uma nova variável $y = e^{a(x-x_0)}$, obtém-se

$$\frac{1}{a} \int_{y_i}^y \frac{dy}{(\epsilon y^2 + \frac{\alpha}{a} y - \frac{\alpha}{2a})^{\frac{1}{2}}} = t - t_i, \quad (8)$$

onde t_i corresponde ao tempo inicial, relacionado a posição inicial x_i ou, equivalentemente, $y_i = e^{a(x_i-x_0)}$.

A solução da Eq. (8) depende do coeficiente de y^2 no denominador do integrando, *i.e.*, de acordo com o valor dado a ϵ encontra-se soluções diferentes para tal equação. Como já foi visto na Eq. (6), o valor de ϵ 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 ($\epsilon > 0$).

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 $\left(\frac{\alpha}{a} y - \frac{\alpha}{2a} \right) = u$, e integrando, chega-se ao seguinte resultado

$$x(t) = x_0 + \frac{1}{a} \ln \left(\frac{1 + \omega_0^2 (t - t'_i)^2}{2} \right), \quad (9)$$

onde $\omega_0^2 = \frac{2Da^2}{m}$ e $t'_i = t_i - \frac{2}{\alpha} \left(\frac{\alpha}{a} y_i - \frac{\alpha}{2a} \right)^{\frac{1}{2}}$. A partir dessa solução é feito o gráfico apresentado na Fig. 2, que exemplifica o comportamento da posição em função do tempo usando um conjunto fixo de parâmetros (m, a, D e x_0) e fixando a energia e a posição inicial ($x_i = x_0$) no tempo $t_i = 0$.

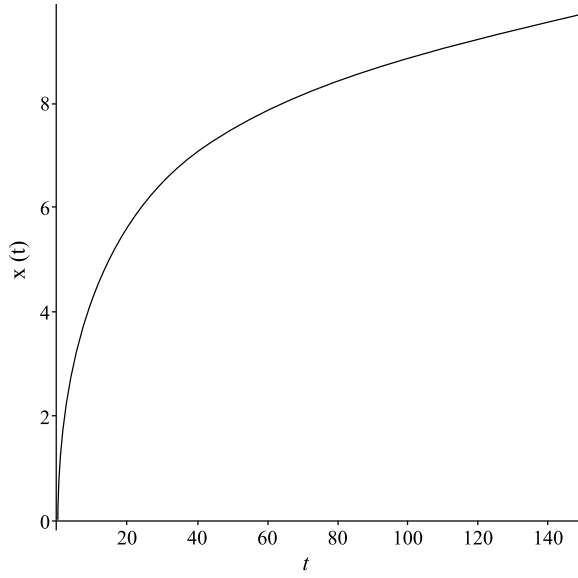


Figura 2 - Gráfico da posição pelo tempo (Eq. (9)), com $E = 0$, $x_0 = 0$, $D = a = m = 1$, $t_i = 0$ e $y_i = 1$.

No segundo caso, que trabalha com valores positivos da energia, a resolução da Eq. (8) torna-se um pouco mais complexa e pode ser verificada detalhadamente no apêndice A. A solução final (A-7) é

$$x(t) = x_0 + \frac{1}{a} \ln \left\{ \frac{D}{E} \left(\sqrt{\frac{E+D}{D}} \cosh \left[\left(\frac{E}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \omega_0(t-t'_i) \right] - 1 \right) \right\}. \quad (10)$$

Uma curva típica que emerge da Eq. (10) é mostrada na Fig. 3. Nesse caso foram fixados os valores de $(m, a, D \text{ e } x_0)$, assim como a energia e adotou-se $x_i = x_0$ para $t_i = 0$.

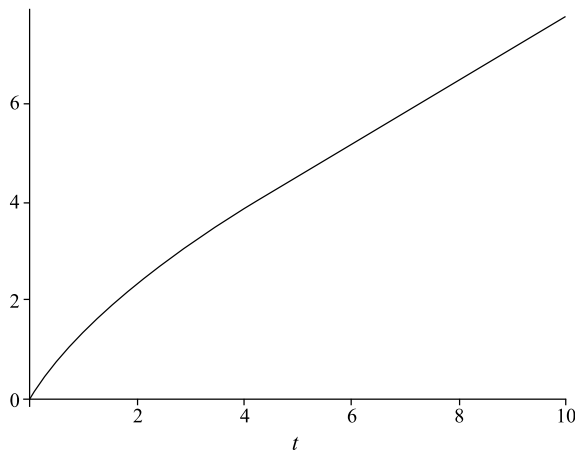


Figura 3 - Gráfico da $x(t)$ dado pela Eq. (10), com $E = 0,2$, $x_0 = 0$, $D = a = m = 1$, $t_i = 0$ e $y_i = 1$.

Por fim, o procedimento completo para resolver a Eq. (8) quando a energia for negativa ($\epsilon < 0$) apresenta-

se no apêndice B. A solução encontrada (Eq. (B-8)) é

$$x(t) = x_0 + \frac{1}{a} \ln \left\{ -\frac{D}{E} \left(1 - \sqrt{\frac{E+D}{D}} \cos \left[\left(\frac{-D}{E} \right)^{\frac{1}{2}} \omega_0(t-t'_i) \right] \right) \right\}. \quad (11)$$

A Fig. 4 ilustra a posição da partícula no sistema em relação ao tempo de acordo com a Eq. (11), são fixados os valores dos parâmetros m, a, D e x_0 , a energia do sistema e a posição inicial x_i (ou equivalentemente, y_i) no tempo $t_i = 0$.

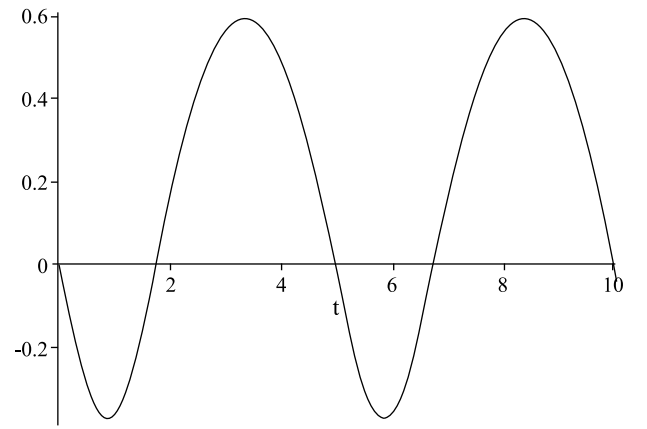


Figura 4 - Gráfico de $x(t) \times t$ (Eq. (16)), com $E = -0,8$, $x_0 = 0$, $D = a = m = 1$, $t_i = 0$ e $y_i = 1$.

4. Discussão dos resultados e conclusão

As soluções encontradas coincidem com aquelas dadas na literatura [6], porém sua estrutura permite identificar claramente a influência das condições iniciais. Nos exemplos apresentados nas Figs. 1, 2 e 3 a posição inicial é imediatamente identificável ($y_i = 1$ corresponde a $x_i = x_0$), isso possibilita identificar a energia potencial inicial. Como a energia total é mantida fixa, a energia cinética e, conseqüentemente, a velocidade inicial pode ser facilmente obtida.

Uma vez identificadas a posição e a velocidade inicial é possível construir as trajetórias no espaço de fase para os parâmetros usados até o momento ($m = 1$, $a = 1$, $D = 1$ e $x_0 = 0$) os resultados para diversos valores de ϵ são apresentados na Fig. 5. Observam-se trajetórias fechadas quando $\epsilon < 0$ e órbitas abertas para $\epsilon > 0$, ou seja, para energias correspondentes a $\epsilon < 0$ o sistema é confinante, o que não acontece para energias mais altas.

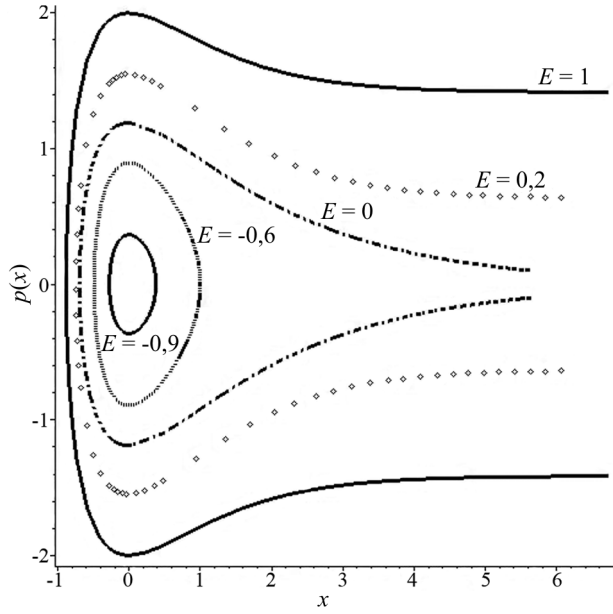


Figura 5 - Espaço de fase para uma partícula sujeita ao potencial de Morse para diferentes valores da energia total E .

Da forma com que foram apresentadas as soluções clássicas de uma partícula sujeita ao potencial de Morse o problema se encontra totalmente resolvido. A partir dessas soluções, cada caso particular, dependendo dos parâmetros do problema tratado e das condições iniciais, pode ser completamente estudado.

Apêndice A

Resolução da Eq. (8) quando a energia total do sistema é maior que zero

Substituindo os valores de $\alpha = 4Da/m$, $\epsilon = 2E/m$, $\omega_0 = \sqrt{2Da^2/m}$ e colocando em evidência o termo $(2D/m)^{\frac{1}{2}} (E/D)^{\frac{1}{2}}$ na Eq. (8), obtém-se

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

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

$$y_1 = -\frac{D}{E} + \frac{D}{E} \sqrt{\frac{D+E}{D}}$$

e

$$y_2 = -\frac{D}{E} - \frac{D}{E} \sqrt{\frac{D+E}{D}}. \quad (\text{A-2})$$

Fazendo alguns ajustes e aplicando a técnica de integração por frações parciais a Eq. (A-1) pode ser re-

escrita como

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(y_1 - y_2)} \int_{y_i}^y \left(\frac{y - y_2}{y - y_1}\right)^{\frac{1}{2}} dy - \\ & \frac{1}{(y_1 - y_2)} \int_{y_i}^y \left(\frac{y - y_1}{y - y_2}\right)^{\frac{1}{2}} dy = \\ & \left(\frac{E}{D}\right)^{\frac{1}{2}} \omega_0(t - t_i). \end{aligned} \quad (\text{A-3})$$

Para se resolver as duas integrais da Eq. (A-3) foram feitas três mudanças de variáveis procedendo-se da seguinte maneira: inicialmente tomando $\omega^2 = y - y_2$, depois $z^2 = \frac{\omega^2}{y_1 - y_2}$ e por fim, $\theta = \text{arccosh}(z)$. Com essas alterações tem-se o seguinte resultado para a Eq. (A-3),

$$\text{arccosh} \left[\left(\frac{y - y_2}{y_1 - y_2}\right)^{\frac{1}{2}} \right] = \left(\frac{E}{D}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\omega_0}{2} (t - t'_i), \quad (\text{A-4})$$

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

Rearranjando a Eq. (A-4) obtém-se a expressão

$$y = y_2 + (y_1 - y_2) \cosh^2 \left[\left(\frac{E}{D}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\omega_0}{2} (t - t'_i) \right]. \quad (\text{A-5})$$

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

$$y = y_2 + \frac{(y_1 - y_2)}{2} + \frac{(y_1 - y_2)}{2} \cosh \left[\left(\frac{E}{D}\right)^{\frac{1}{2}} \omega_0(t - t'_i) \right]. \quad (\text{A-6})$$

Substituindo os valores de y_1 e y_2 (Eq. (A-2)) e o valor de $y = e^{a(x-x_0)}$ na Eq. (A-6), após algumas manipulações algébricas, o resultado é dado por

$$x = x_0 + \frac{1}{a} \ln \left(\frac{D \sqrt{\frac{E+D}{D}} \cosh \left[\frac{E}{D}^{\frac{1}{2}} \omega_0(t - t'_i) \right] - 1}{E} \right). \quad (\text{A-7})$$

Apêndice B

Resolução da Eq. (8) quando a energia total do sistema é menor que zero

Partindo da Eq. (A-1), trabalhando agora com os valores de energia negativos,

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

Da mesma forma que foi mostrado no caso anterior, a Eq. (B-1) pode ser reescrita

$$\frac{1}{(y_1 - y_2)} \int_{y_i}^y \left[\left(\frac{y - y_2}{y - y_1} \right)^{\frac{1}{2}} - \left(\frac{y - y_1}{y - y_2} \right)^{\frac{1}{2}} \right] dy = i \left(-\frac{E}{D} \right)^{1/2} \omega_0(t - t_i), \quad (\text{B-2})$$

sendo y_1 e y_2 as raízes do polinômio presente no denominador da integral da Eq. (B-1) onde

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

Na Eq. (B-2) fazendo-se as mudanças de variáveis $\omega^2 = y_1 - y$, $z^2 = \frac{\omega^2}{y_1 - y_2}$ e $\theta = \arccos(z)$, respeitando esta ordem, tem-se que

$$\arccos \left[\left(\frac{y_1 - y}{y_1 - y_2} \right)^{\frac{1}{2}} \right] - \arccos \left[\left(\frac{y_1 - y_i}{y_1 - y_2} \right)^{\frac{1}{2}} \right] = -\frac{1}{2} \left(-\frac{E}{D} \right)^{1/2} \omega_0(t - t_i), \quad (\text{B-4})$$

ou ainda

$$\arccos \left[\left(\frac{y_1 - y}{y_1 - y_2} \right)^{\frac{1}{2}} \right] = -\frac{1}{2} \left(-\frac{E}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \omega_0(t - t'_i), \quad (\text{B-5})$$

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

A solução indicada na Eq. (B-5) pode ser reescrita da seguinte maneira

$$y = y_1 - (y_1 - y_2) \cos^2 \left[\frac{1}{2} \left(-\frac{E}{D} \right)^{1/2} \omega_0(t - t'_i) \right]. \quad (\text{B-6})$$

Logo, lembrando que $\cos^2(x) + \sin^2(x) = 1$, tem-se que

$$y = y_1 - \frac{(y_1 - y_2)}{2} - \frac{(y_1 - y_2)}{2} \cos \left[\left(-\frac{E}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \omega_0(t - t'_i) \right]. \quad (\text{B-7})$$

Substituindo os valores de y_1 e y_2 dados pelas expressões em (4) e o valor de $y = e^{a(x-x_0)}$ chega-se ao seguinte resultado para equação de movimento

$$x = x_0 + \frac{1}{a} \ln \left(\frac{1 - \sqrt{\frac{E+D}{D}} \cos \left[\frac{-D}{E}^{\frac{1}{2}} \omega_0(t - t'_i) \right]}{1 - \frac{E+D}{D}} \right). \quad (\text{B-8})$$

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro parcial da Secretaria do Estado da Educação do Estado de São Paulo, Pró-Reitoria de Extensão Universitária da UNESP e CNPq.

Referências

- [1] P.M. Morse, Phys. Rev. **34**, 58 (1929).
- [2] P.M. Morse, J.B. Fisk and L.I. Schiff, Phys. Rev. **50**, 748 (1936); V. Kondratyev, *The Structure of Atoms and Molecules* (Ed. Mir, Moscou, 1967), p. 351; L.I. Schiff, *Quantum Mechanics* (McGraw Hill, Nova Iorque, 1968), p. 451.
- [3] D.A. Morales, Chem. Phys. Lett. **161**, 253 (1989).
- [4] M. Bag, M.M. Panja, R. Dutt and Y.P. Varshni, Phys. Rev. **A46** 6059 (1992); E. Drigo Filho and R.M. Ricotta, Phys. Lett. **A269**, 269 (2000); E.F. de Lima and J.E.M. Hornos, J. Phys. **B38**, 815 (2005); E. Drigo Filho, J. Phys. A: Math. Gen. **21**, L1025 (1988).
- [5] F.Y. Li and R.S. Berry, J. Phys. Chem. **99**, 15557 (1995).
- [6] W.C. DeMarcus, Am. J. Phys. **46**, 733 (1978).
- [7] D. Reguera and G. Birnbaum, J. Chem. Phys. **125**, 184304 (2006).
- [8] M. Peyrard and A.R. Bishop, Phys. Rev. Lett. **62**, 2755 (1989).
- [9] M. Techera, L.L. Daemen and E.W. Prohofsky, Phys. Rev. **40**, 6636 (1989).
- [10] M. Peyrard, Nonlinearity **17**, R1 (2004).
- [11] E. Drigo Filho and A. Agostinho Neto, Trends Phys. Chem. **10**, 65 (2004).