

Moléculas formadas por átomos hidrogenóides como poços de potencial finito: solução numérica da equação de Schrödinger e proposta de extensão didática via modelos mentais

Molecules formed by hydrogen atoms as finite potential wells: numerical solution of the Schrödinger equation and proposal for didactic extension via mental models

Hudson R. Armando¹, Marcello Ferreira¹, Olavo L. Silva Filho¹, David L. Azevedo^{*1}

¹Universidade de Brasília, Instituto de Física, Centro Internacional de Física, Brasília, DF, Brasil.

Recebido em 09 de fevereiro de 2025. Revisado em 18 de março de 2025. Aceito em 18 de março de 2025.

Neste artigo, resolvemos numericamente a equação de Schrödinger unidimensional com um potencial do tipo caixa (com profundidade finita) para sistemas de moléculas diatômicas homonucleares e heteronucleares. As moléculas analisadas são compostas por elementos pertencentes à família 1A da tabela periódica, visando obter estimativa da profundidade de uma caixa de potencial finita que melhor descreva cada uma das moléculas em questão. Determinamos, assim, quais valores da profundidade da caixa de potencial e largura (diâmetro atômico) fazem o modelo reproduzir as auto-energias do estado fundamental obtidas pelo método *ab-initio* Hartree-Fock com uma base def2-TVZP. As soluções numéricas encontradas, que reproduzem os resultados *ab-initio*, equivalem às profundidades V_0 no intervalo de -0.84 a -0.14 Ha e largura L (diâmetro molecular) no intervalo de 2.8 a 14.7 Bohr. Além da solução, buscaremos indicar, como extensão, possível abordagem didática dessa formulação, tomando por referencial teórico a perspectiva da representação, por modelos mentais, de Johnson-Laird, o que se mostrará justificável pelas propriedades fenomenológicas do objeto conceitual.

Palavras-chave: Equação de Schrödinger, Hartree-Fock, Moléculas diatômicas, Potencial caixa, Modelos mentais de Johnson-Laird.

In this paper, we numerically solve the one-dimensional Schrödinger equation with a box-type potential (of finite depth) for systems of homonuclear and heteronuclear diatomic molecules. The analyzed molecules are composed of elements from the 1A group of the periodic table, aiming to estimate the depth of a finite potential box that best describes each of the molecules under study. We determine the values of the potential box depth and width (atomic diameter) that allow the model to reproduce the ground-state eigenenergies obtained using the *ab-initio* Hartree-Fock method with a def2-TVZP basis set. The numerical solutions found, which match the *ab-initio* results, correspond to potential depths V_0 ranging from -0.84 to -0.14 Ha and widths L (molecular diameter) ranging from 2.8 to 14.7 Bohr. In addition, we will aim to propose, as an extension, a possible didactic approach to this formulation, using Johnson-Laird's theory of mental representation, by his mental models, as a theoretical framework, which will be justified by the phenomenological properties of the conceptual object.

Keywords: Schrödinger equation, Hartree-Fock, Diatomic molecules, Box potential, Johnson-Laird's mental models.

1. Introdução

Nas diversas interpretações da teoria quântica, a equação de Schrödinger desempenha um papel central na descrição do comportamento dos sistemas em escala atômica e molecular [1]. Desenvolvida em 1925, ela determina a evolução temporal das funções de onda, descrevendo de maneira abrangente o estado do sistema em termos das suas propriedades quânticas. As informações que podem ser conhecidas são expressas por uma função complexa, conhecida como função de onda, que depende

da posição e do momento linear de cada partícula do sistema. Na formulação introduzida por Dirac, o estado quântico é representado por um vetor em um espaço vetorial complexo [2].

Em sistemas compostos por um único átomo ou por moléculas diatômicas homonucleares, a equação de Schrödinger é eficaz na descrição de seus possíveis estados energéticos e das correspondentes funções de onda. Seu uso para essa finalidade já é bem consolidado na literatura científica [3–7]. Por exemplo, para o clássico problema do átomo de hidrogênio, a equação prevê com precisão os níveis discretos de energia, além das distribuições de probabilidade associadas à presença de um elétron em determinada região ao redor do núcleo

*Endereço de correspondência: david888azv@unb.br

Editor-Chefe: Marcello Ferreira

atômico [8, 9]. Essa abordagem é *sine qua non* para entender fenômenos como espectros atômicos e processos de ionização.

O processo de dedução da equação de Schrödinger é baseado na especificação:

$$p \rightarrow \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad x \rightarrow \hat{x} = x, \quad (1)$$

em que as funções clássicas x e p são tomadas pelos operadores da Mecânica Quântica, respectivamente, $\hat{x}$ e $\hat{p}$, utilizados associadamente a um operador Hamiltoniano clássico H , para produzir a identificação:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x), \quad (2)$$

de que se obtém:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}, \quad (3)$$

em que surge uma nova função $\psi(x, t)$, a denominada *função de onda*. Epistemologicamente [10], desde a *Interpretação de Copenhagen*, a função de onda tem sido objeto de interesse e debates que escapam aos objetivos primários desta discussão, mas que convém permanecerem no horizonte de quem quer que tenha interesse em análises críticas dessa formulação. A esse propósito, sugere-se a leitura dos trabalhos de Silva Filho e Ferreira (2024-2025) [11–15] e de Filho, Ferreira e Amorim (2022) [16].

Seja como for, estudos teóricos e experimentais continuam a explorar as implicações da equação de Schrödinger em diversas áreas, desde a química computacional até à física de materiais. A precisão dos resultados obtidos por meio dessa equação valida sua utilidade na previsão de comportamentos quânticos e no desenvolvimento de tecnologias baseadas em seus princípios [17–19].

As moléculas diatômicas são formadas por átomos que podem ser idênticos ou diferentes e apresentam particularidades em suas ligações e vibrações. A descrição quântica detalhada dessas moléculas é essencial para uma compreensão aprofundada de sua estrutura eletrônica e das respectivas interações moleculares [5, 20]. Embora a equação de Schrödinger possa ser resolvida para calcular os níveis de energia molecular e as funções de onda correspondentes, o processo é complexo. Ele requer a separação dos movimentos eletrônicos e nucleares por meio da aproximação de Born-Oppenheimer [21]. Essa solução envolve determinar a energia eletrônica para posições fixas dos núcleos e, subsequentemente, resolver a equação de Schrödinger nuclear para obter os níveis de energia vibracional e rotacional da molécula [22].

Neste trabalho, nos dedicamos a uma representação simplificada para um problema complexo: o estudo de moléculas diatômicas. Embora esses sistemas idealmente requeiram uma abordagem da mecânica quântica de muitos corpos, propomos aqui uma solução numérica

da equação de Schrödinger unidimensional para um potencial do tipo caixa de profundidade finita. Esta idealização serve como um modelo aproximado para moléculas diatômicas ou heteronucleares. Aquelas aqui examinadas, entretanto, são constituídas exclusivamente por elementos da família 1A da tabela periódica, que se caracterizam por possuírem um orbital de valência do tipo 1s. Essa característica é crucial para a aplicação efetiva do modelo proposto. No entanto, os elementos Rubídio (Rb), Césio (Cs) e Frâncio (Fr) foram intencionalmente excluídos das análises devido aos seus números atômicos Z , que são, respectivamente, 37, 55 e 87. Esse procedimento justifica-se pela abordagem didática intencionalmente simplificada que foi adotada para tratar o problema em questão, a qual desconsidera os efeitos relativísticos. Estes, de fato, tornam-se significativos em átomos com $Z \gtrsim 30$, críticos em $Z \gtrsim 50$ e absolutamente necessários para uma análise precisa quando $Z > 80$ [23–26].

Levando-se isto em conta, determinamos quais valores de profundidade da caixa de potencial e largura (diâmetro atômico) permitem que o modelo reproduza as auto-energias do estado fundamental obtidas pelo método *ab-initio* Hartree-Fock com base def2-TVZP. As soluções numéricas encontradas, que replicam os resultados *ab-initio*, indicam profundidades no intervalo de -0.84 a -0.14 Hartree (Ha) e largura (diâmetro molecular) entre 2.8 e 14.7 Bohr.

Além disso, como extensão, propomos uma abordagem didática para essa formulação, fundamentada na representação mental de Johnson-Laird [27]. Ela se justifica pelas propriedades fenomenológicas do objeto conceitual, como altos níveis de abstração e formalismo matemático, a impossibilidade de emulação em sistemas físicos em escalas perceptíveis pela cognição humana e seus predicados ontológicos [28].

2. Materiais e Métodos

2.1. Método de diferenças finitas

O método de diferenças finitas consiste essencialmente em discretizar a variável de integração do problema em estudo e transformar as equações diferenciais em sistemas de equações algébricas [29]. Dessa maneira, é possível aproximar o cálculo de derivadas por meio de diferenças finitas ascendentes, descendentes ou centradas, com uma precisão dependente apenas do número de pontos adotados e do espaçamento entre eles definido [30].

Aplicando-o, pode-se obter uma boa aproximação da segunda derivada presente na equação de Schrödinger por meio da expressão:

$$-\frac{1}{2} \frac{\psi_\alpha(x_{i+1}) - 2\psi_\alpha(x_i) + \psi_\alpha(x_{i-1}))}{h^2} + V(x_i)\psi_\alpha = E\psi_\alpha \quad (4)$$

em que foi considerado $\hbar = m = 1$ [31].

Por meio das soluções da equação (4), é possível obter os valores das autoenergias E em função do comprimento da caixa de potencial V com satisfatória precisão.

Analogamente ao estudo desenvolvido em publicação anterior para átomos hidrogenóides [29], a equação (4) foi implementada em *scripts* na linguagem de programação Python [32] para modelar uma caixa de potencial com largura L em um intervalo de integração de $[-20, 20]$, sub-dividido em 5.000 pontos e um passo de integração $h = 0.008$.

2.2. Método Hartree-Fock

O método Hartree-Fock [33–35] foi utilizado como referência para validar a solução numérica da equação de Schrödinger. Tipificado como *ab initio*, é amplamente empregado para determinar a estrutura eletrônica de átomos e moléculas. A abordagem, que se fundamenta na Mecânica Quântica, assume que o estado quântico dos elétrons pode ser descrito por um único determinante de Slater, uma representação matemática que garante a antissimetria das funções de onda eletrônicas, conforme exigido pelo princípio de exclusão de Pauli. Nesse formalismo, cada elétron é tratado como uma partícula que se move no campo médio gerado pelos homólogos, resultando em equações autoconsistentes – nomeadamente, Hartree-Fock.

A solução dessas equações envolve a aplicação de técnicas iterativas para atingir a consistência entre os orbitais moleculares iniciais e finais, procedimento conhecido como SCF – *Self-Consistent Field*. Inicialmente, escolhem-se orbitais atômicos (ou funções de base) como uma aproximação inicial, calculando-se, então, o potencial médio no qual cada elétron interage. Esses orbitais são sucessivamente recalculados até atingir um estado em que a energia total do sistema apresenta variações abaixo de um limiar previamente estabelecido, indicando a convergência do processo iterativo.

Para garanti-la, empregam-se critérios quantitativos, como a variação na energia total entre iterações sucessivas (usualmente, valores inferiores a 10^{-5} ou 10^{-6} Hartrees são considerados satisfatórios). Além disso, critérios baseados na variação das densidades eletrônicas ou dos coeficientes dos orbitais moleculares são frequentemente aplicados. Por sua natureza quântica de primeiros princípios, ele é eficaz em produzir aproximações bastante precisas no cálculo do estado fundamental de sistemas de muitos corpos, como elétrons em átomos, moléculas ou sólidos [36, 37].

O método Hartree-Fock não restrito (UHF, de *unrestricted Hartree-Fock*) implementado no programa Gaussian 09 [38] foi utilizado para descrever moléculas homonucleares e heteronucleares formadas pelas diferentes combinações possíveis dos elementos de H , Li , Na e K , considerando que essa aproximação é capaz de tratar tanto de moléculas com camada eletrônica fechada, quanto aquelas com camada aberta.

Vale ressaltar que o conjunto de base utilizada foi a def2-TVZP [39, 40]. A abreviatura pode ser sucintamente traduzida da seguinte maneira:

- **def2** refere-se à família de funções de bases desenvolvidas por Ahlrichs e colaboradores [41], que são otimizadas para a segunda geração de cálculos consistentes em correlação;
- **TZ (Triple Zeta)** indica a utilização de três funções para descrever cada orbital; e
- **VP**, que significa função de polarização, e é acionado para descrever a polarização dos orbitais, permitindo melhor tratamento da correlação e da resposta da molécula a campos elétricos externos.

Em essência, def2-TVZP corresponde a um conjunto de bases polarizadas de valência tripla zeta que apresenta um ótimo equilíbrio entre precisão e custo computacional.

3. Resultados e Discussões

Na pesquisa relatada neste artigo, o método de diferenças finitas é utilizado para resolver numericamente a equação de Schrödinger para moléculas diatômicas homonucleares e heteronucleares submetidas a um potencial retangular unidimensional, também conhecido como potencial caixa (Figura 1). As moléculas analisadas são compostas por elementos da família 1A da tabela periódica, isto é, que possuem apenas um elétron na camada de valência e com orbitais esféricos.

Primeiramente, foi construída a geometria inicial das moléculas homonucleares e heteronucleares no programa gaussview; então, foram adicionadas as funções de base def2-TVZP e selecionado o método Hartree-Fock. Foi executada uma otimização completa de geometria utilizando os seguintes parâmetros de convergência:

Obtivemos o estado fundamental de cada molécula composta exclusivamente pelos átomos: H , Li , Na e K . As geometrias iniciais determinaram-se a partir de

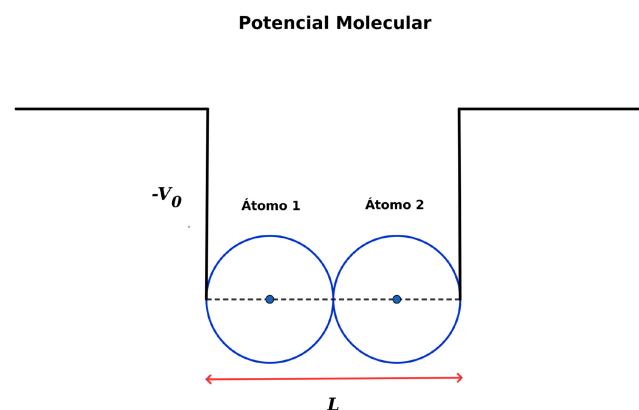


Figura 1: Idealização do modelo: Poço de potencial molecular com profundidade V_0 e largura L correspondendo a dois diâmetros atômicos.

Tabela 1: Moléculas diatômicas homonucleares; comprimento de ligação (r_e); largura estimada da caixa (L); profundidade estimada da caixa (V_0); e energia (E_H) do estado fundamental da molécula na aproximação Hartree-Fock (HF).

Molécula	Experimental*		Estimativa	HF
	r_e (Å)	L (Bohr)	V_0 (Ha)	E_H (Ha)
H_2	0.74100	2.80057	-0.84797	-0.59630
Li_2	2.67300	10.10248	-0.20755	-0.17956
Na_2	3.07900	11.63693	-0.18635	-0.16415
K_2	3.90510	14.75914	-0.14397	-0.12962

dados experimentais e foi realizada uma estimativa das profundidades do poço de potencial (V_0) que mais bem correspondessem às energias do estado fundamental das moléculas analisadas, utilizando-se da aproximação Hartree-Fock com a base def2-TZVP. Essa estimativa considerou o diâmetro atômico (L) e a energia do estado fundamental (E) indicados na Tabela 1.

Utilizamos o método de diferenças finitas, conforme expresso na equação 4, para calcular as autoenergias que estão apresentadas nas Tabelas 1 e 2. A execução desses cálculos dependem da utilização dos valores da largura L da caixa (para aplicar-se as condições de

Tabela 2: Moléculas diatômicas heteronucleares; comprimento de ligação (r_e); largura estimada da caixa (L); profundidade estimada da caixa (V_0) e energia (E_H) do estado fundamental da molécula na aproximação Hartree-Fock.

Molécula	Experimental*		Estimativa	HF
	r_e (Å)	L (Bohr)	V_0 (Ha)	E_H (Ha)
LiH	1.59490	6.02785	-0.37107	-0.30161
NaH	1.88740	7.13334	-0.32649	-0.27381
KH	2.24300	8.47731	-0.27669	-0.23757
LiNa	2.88900	10.91884	-0.19598	-0.17144
LiK	3.27000	12.35881	-0.17009	-0.15046
NaK	3.58900	13.56445	-0.16178	-0.14499

contorno em $-L/2$ e $L/2$) e da magnitude do potencial (profundidade) da caixa, conforme descrito em [42].

Para obter os resultados apresentados nos gráficos das Figuras 2 e 3, foram desenvolvidos dois programas computacionais: um em linguagem FORTRAN (Apêndice A) e outro em CUDA Python (Apêndice B). Ambos são capazes de resolver a equação de Schrödinger em uma dimensão para qualquer forma de potencial, utilizando o método de diferenças finitas. Com esses recursos,

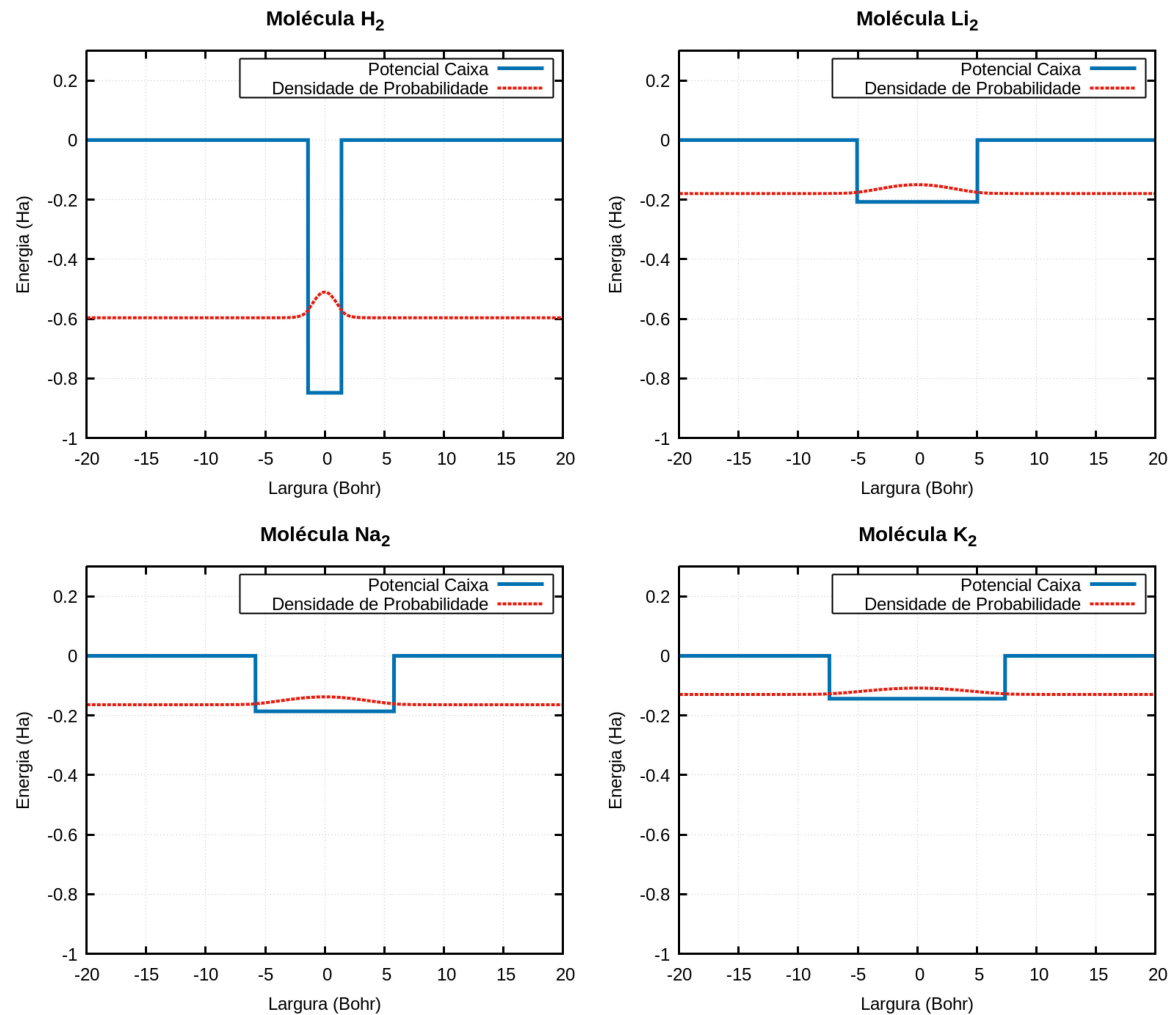


Figura 2: Funções Densidade de Probabilidade das moléculas diatômicas homonucleares da Tabela 1 e seus respectivos potenciais.

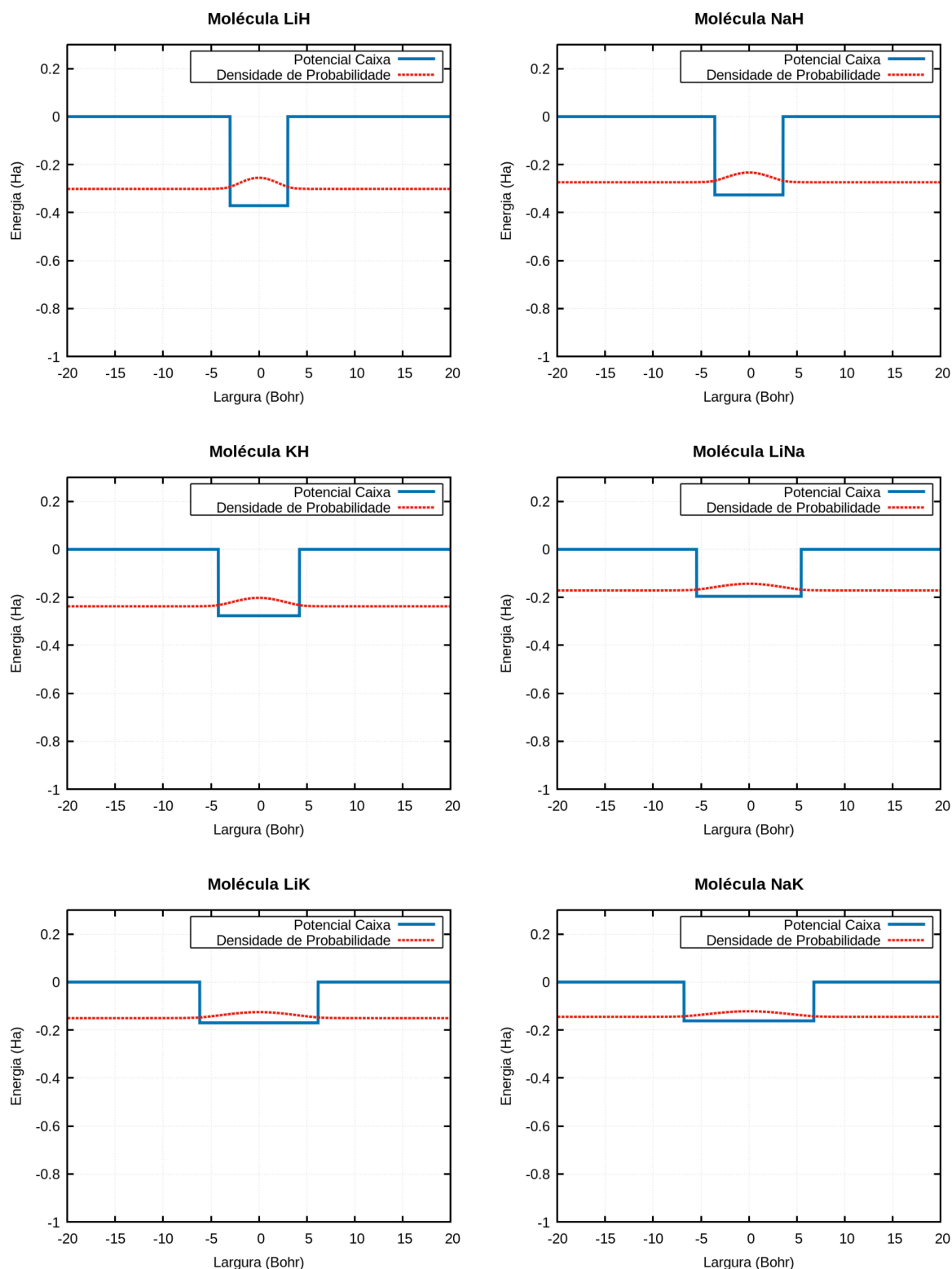


Figura 3: Funções Densidade de Probabilidade das moléculas diatômicas heteronucleares da Tabela 2 e seus respectivos potenciais.

calculamos com precisão as autoenergias do estado fundamental para as moléculas diatômicas estudadas, obtendo resultados comparáveis aos providos pelo *software* comercial Gaussian 09. Esse ganho de acessibilidade

econômica não é uma dimensão desprezível, sobretudo no contexto da Física brasileira, em que os recursos são escassos e a ausência de soluções alternativas, de menores (ou sem) custos, precarizam ou limitam o

prosseguimento de determinadas técnicas e linhas de pesquisa e, conseqüentemente, de materiais e métodos de ensino.

Atribuindo às constantes V_a e l_a os valores correspondentes a V_0 e L das tabelas 1 e 2, inicialmente obtidos pelos códigos em Python mencionado anteriormente, foram gerados arquivos contendo diversos resultados. Esses arquivos permitiram a plotagem gráfica do potencial da caixa e da função densidade de probabilidade. A densidade de probabilidade foi calculada a partir dos valores dos autovetores obtidos simultaneamente durante a simulação. Finalmente, com um *script* GNUPLOT [43], a partir do autovetor do estado fundamental, calculamos o quadrado de $y(x)$ para determinar a densidade de probabilidade da função de onda, representada pelas curvas vermelhas nas figuras 2 e 3.

Ao analisar o formato das caixas de potencial ilustradas na Figura (2), é possível verificar de imediato que a caixa da molécula de H_2 é expressivamente mais profunda e mais estreita em relação às demais. Esse resultado gráfico é coerente com as sólidas previsões teóricas e os inúmeros experimentos já realizados com essas moléculas [44, 45]. Assim, como a molécula de H_2 possui alta energia de ligação (4.52 eV) e curto comprimento de ligação ($0.74\text{ \AA}$); seus elétrons estão mais fortemente ligados e, conseqüentemente, mais próximos do núcleo, resultando num poço de potencial mais profundo e estreito [46]. Outro fator a ser levado em consideração é a massa reduzida do H_2 em relação às outras moléculas analisadas. Em um dado modelo de poço de potencial, um sistema com massa menor propicia uma maior delocalização da função de onda dos átomos, ou seja, a função de onda tende a se espalhar mais para o mesmo potencial. Por sua vez, esse espalhamento é compensado por um aumento significativo da profundidade do poço a fim de manter o potencial desejado [9]. Do ponto de vista do ensino de Física, essa dimensão faz com que o estabelecimento de modelos mentais valham a pena, dado que mimetizam relações físicas (consequenciais, relacionais ou de proporção direta ou inversa etc.).

Nas moléculas diatômicas homonucleares mais pesadas e nas heteronucleares ilustradas na Figura (3), verifica-se maior afastamento dos elétrons de valência em relação aos núcleos atômicos, ocasionando poços de potencial mais rasos e mais largos. Essa redução gradual das profundidades dos poços de potencial devem-se, ademais, ao maior efeito de blindagem que essas moléculas apresentam. Tal efeito gera, para os elétrons de valência, carga nuclear efetiva significativamente menor em relação à total [8].

4. Possíveis Extensões Didáticas a Partir dos Modelos Mentais de Johnson-Laird

Além da solução numérica que integra o cerne desta pesquisa, compreende-se possível, como extensão, ensaiar

abordagens didáticas dessa formulação. No caso, o fazemos tomando por referencial teórico a perspectiva da representação, via modelos mentais, de Johnson-Laird, o que se mostra justificável pelas propriedades fenomenológicas do objeto conceitual da Mecânica Quântica e, em particular, da equação de Schrödinger, quais sejam: altos níveis de abstração conceitual e de formalismo matemático, impossibilidade de emulação em sistemas físicos a escalas assumíveis pela percepção cognitiva humana e os predicados de sua ontologia [28].

Os modelos mentais de Johnson-Laird são subsumidos pelo corpo teórico cognitivo fornecido pela psicologia experimental do Século XX numa perspectiva representacional – isto é, de acesso indireto a uma formulação lógico-proposicional, fenomenológica, empírica, descritiva, comparativa, psicomotora ou afetiva. Constituem representações internas estruturais que funcionam como análogos do mundo externo, considerado como *real* (*data venia* para o uso descuidado de rigores filosóficos) e que medeiam o entendimento, a explicação e capacidade de inferência.

Trata-se de uma teoria dedicada à análise de processos de assimilação de conhecimentos, em caráter descritivo, não se propondo normativamente como teoria de ensino (isto é, não prescreve métodos ou regras acerca de como ensinar). Seu uso em abordagens didáticas, portanto, deve assumir e combinar teorias educacionais normativas que possam integrar as características e potenciais funcionalidades do corpo teórico dos modelos mentais (ou de representações mentais) de Johnson-Laird.

Tais modelos variam em complexidade, manifestando-se desde representações simples até à forma de teorias científicas elaboradas, tendo por princípios (requisitos estruturais): computabilidade, finitude, construtivismo, economia, não indeterminação, predicabilidade, inatismo, número finito de primitivos conceituais e identidade estrutural (por limitações de escopo e espaço, os princípios são enunciados com o objetivo de dar materialidade à natureza representacional da Mecânica Quântica, sem grandes desenvolvimentos, o que pode ser detalhadamente conferido em [28]). Essa estrutura toma a mente humana como um sistema complexo, hierarquizado e apto a recepcionar, dar sentido, manter por tempo razoavelmente longo e acionar conhecimentos a partir de demandas intelectivas.

No ensino, modelos mentais favorecem a compreensão de sistemas físicos; entretanto, diferentemente da completude e consistência dos modelos conceituais, são usualmente incompletos e imprecisos, porém flexíveis e plásticos a uma diversidade de demandas cognitivas. Nesse particular, tem ascendência o professor ao refletir, escolher, customizar, didatizar e avaliar modelos conceituais com vistas ao desenvolvimento, de parte dos estudantes, de análogos consistentes com os sistemas físicos que se objetiva representar.

Os modelos mentais podem ser dedicados à compreensão de aparatos fenomenológicos complexos, como é o

caso de distribuições quânticas, valendo-se de demonstrações, comparações, analogias audiovisuais ou táteis, ilustrações gráficas, sínteses representativas, relações de proporcionalidade (de escala, massa, potencial, energia, formas de ligação, distribuições de probabilidade, comportamento atômico etc.). Esse recurso, num processo didático, pode ser um bom indutor de engajamento e de exploração de objetos conceituais primitivos em situações de hiatos significativos entre conhecimentos prévios e visados, sem os quais não se poderia esperar progressões de aprendizagem. Bem alocados numa sequência de ensino e aprendizagem, instituída por problemática de relevância, conteúdos e procedimentos didáticos bem orquestrados, mediação clara e qualificada e avaliação que se aproprie adequadamente de instrumentos e indicadores de desenvolvimento cognitivo, os modelos mentais podem favorecer uma compreensão criativa, crítica, significativa e evolutiva de uma teoria abstrata como a Quântica.

5. Considerações Finais

Para obtenção dos resultados relatados neste artigo, empregam-se códigos em fortran e Cuda python para obter soluções numéricas da equação de Schrödinger pelos métodos de diferenças finitas. Essas soluções, que já haviam sido exitosamente utilizadas na descrição de sistemas de átomos hidrogenóides sujeitos a um potencial tipo caixa, com altura V_0 e largura L [29], foram úteis à extensão deste modelo para sistemas de moléculas diatômicas formadas pelos átomos da família 1A da tabela periódica.

Os resultados obtidos oferecem informações detalhadas acerca das propriedades quânticas desses sistemas, como a estrutura de níveis de energia e as formas das funções de onda. Os dados são importantes para compreender o comportamento e as propriedades de átomos e moléculas em diversas áreas da Física e da Química Quântica sem a necessidade de uma solução analítica da equação de Schrödinger. Essa é uma vantagem particularmente relevante quando há, associado ao interesse científico, uma intencionalidade didática, haja vista que os métodos alternativos de derivação ou de obtenção de soluções nesse campo, como discutido em [11–16, 28], têm efeitos positivos no estabelecimento de objetos conceituais elementares ao desenvolvimento de conhecimentos avançados.

Em decorrência da limitação natural imposta pela dificuldade de se obter soluções exatas para a equação de Schrödinger, foi proposta uma abordagem numérica mediada por um algoritmo baseado no método de diferenças finitas, capaz de obter as autoenergias dos sistemas moleculares elencados nas Tabelas 1 e 2. Para isso, foram utilizados os parâmetros da profundidade do potencial caixa (V_0) e a respectiva largura (L), novamente com referência ao estudo anterior para átomos hidrogenóides [29].

O algoritmo desta feita descrito caracteriza-se por resolver o problema para cada molécula diatômica com uma caixa de potencial finita. Nos apêndices A e B, respectivamente, são apresentados os programas nas linguagens FORTRAN e Cuda Python que foram utilizados nas análises aqui desenvolvidas. Neles, as constantes V_a e l_a são definidas com os valores correspondentes a V_0 e L , conforme expressos nas Tabelas 1 e 2. A versão Cuda python, em particular, permitiu utilizar de toda capacidade computacional das placas NVidia de última geração, podendo ser utilizada para resolver problemas que exijam maior esforço computacional.

Por fim, faz recurso aos predicados da teoria dos modelos mentais (ou das representações mentais) de Jonhson-Laird para postular indicativos de apropriação didática do método e dos resultados desenvolvidos neste artigo, considerando a apropriação fenomenológica do objeto conceitual da solução numérica da equação de Schrödinger – e, *lato sensu*, da Mecânica Quântica –, quais sejam: altos níveis de abstração conceitual e de formalismo matemático, impossibilidade de emulação em sistemas físicos a escalas assumíveis pela percepção cognitiva humana e os predicados de sua ontologia. Esse tipo de aproximação tem ganhado relevância em trabalhos que abordam temas clássicos e de fronteira do conhecimento a partir do reconhecimento da relevância de associar conhecimento científico de qualidade e referenciais teórico-metodológicos de ensino-aprendizagem robustos em direção à qualificação do ensino de Física.

Agradecimentos

Os autores registram o apoio do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq (Processos 315623/2021-7 e 310465/2022-2) e à Fundação de Apoio à Pesquisa do Distrito Federal – FAPDF (Editais 04/2017 e 09/2022).

Material suplementar

O seguinte material suplementar está disponível on-line:

Apêndice A – Programa em FORTRAN utilizado para gerar as funções de onda das moléculas diatômicas relacionadas nas tabelas 1 e 2.

Apêndice B – Script em Cuda Python utilizado para gerar as funções de onda das moléculas diatômicas relacionadas nas tabelas 1 e 2.

Referências

- [1] J.L. Lopes, *Introdução à teoria atômica da matéria* (Ao Livro Técnico, Rio de Janeiro, 1957).
- [2] E. Schrödinger, *Physical Review* **28**, 1049 (1926).
- [3] R. Shankar, *Principles of quantum mechanics* (Springer Science & Business Media, New Haven, 2012).
- [4] A. Messiah, *Quantum mechanics* (Courier, Paris, 2014).
- [5] P.W. Atkins e R.S. Friedman, *Molecular quantum mechanics* (Oxford University Press, Oxford, 2011).

- [6] A. Szabo e N.S. Ostlund, *Modern quantum chemistry: introduction to advanced electronic structure theory* (Courier, New York, 2012).
- [7] L.R. Ganesan e M. Balaji, *Journal of Chemistry* **5**, 659 (2008).
- [8] I.N. Levine, *Quantum chemistry* (Pearson, Boston, 2013).
- [9] D.J. Griffiths e D.F. Schroeter, *Introduction to quantum mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2018).
- [10] J. Faye, em: *The Stanford Encyclopedia of Philosophy*, editado por E.N. Zalta (Stanford University, Stanford, 2019).
- [11] O.L. Silva Filho e M. Ferreira, *Rev. Bras. Ens. Fís.* **46** e20240183 (2024).
- [12] O.L. Silva Filho e M. Ferreira, *Rev. Bras. Ens. Fís.* **46** e20240219 (2024).
- [13] O.L. Silva Filho e M. Ferreira, *Rev. Bras. Ens. Fís.* **46** e20240228 (2024).
- [14] O.L. Silva Filho e M. Ferreira, *Rev. Bras. Ens. Fís.* **46** e20240234 (2024).
- [15] O.L. Silva Filho e M. Ferreira, *Rev. Bras. Ens. Fís.* **47** e20240426 (2025).
- [16] O.L. Silva Filho, M. Ferreira e R.G.G. Amorim, *Rev. Bras. Ens. Fís.* **44** e20220109 (2022).
- [17] M.A. Nielsen e I.L. Chuang, *Quantum computation and quantum information* (Cambridge University Press, Cambridge, 2010).
- [18] J. Glimm e A. Jaffe, *Quantum physics: a functional integral point of view* (Springer Science & Business Media, New York, 2012).
- [19] N. Zettili, *Quantum mechanics: concepts and applications* (John Wiley & Sons, Jacksonville, 2009).
- [20] J.L. McHale, *Molecular spectroscopy* (CRC Press, Eau Claire, 2017).
- [21] J.J. Sakurai e J. Napolitano, *Modern quantum mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2020).
- [22] A.W. Jasper, S. Nangia, C. Zhu e D.G. Truhlar, *Accounts of Chemical Research* **39**, 101 (2006).
- [23] P. Pyykkö, *Chemical Reviews* **88**, 563 (1988).
- [24] P. Schwerdtfeger, *Heteroatom Chemistry* **13**, 578 (2002).
- [25] K.G. Fdyall e K. Faegri, *Introduction to relativistic quantum chemistry* (Oxford University Press, Oxford, 2007).
- [26] M. Reiher e A. Wolf, *Relativistic quantum chemistry: the fundamental theory of molecular science* (John Wiley & Sons, New Jersey, 2014).
- [27] P.N. Johnson-Laird, *Trends in Cognitive Sciences* **5**, 434 (2001).
- [28] O.L. Silva Filho e M. Ferreira, *Rev. Bras. Ens. Fís.* **43** e20200508 (2021).
- [29] H.R. Armando, K.H. Abbehausen, C.S. Costa, L.S. Barbosa e D.L. Azevedo, *e-Boletim da Física*, **11**, 1 (2023).
- [30] G.A. Monerat, L.G. Ferreira Filho, E.V. Corrêa-Silva, G. Oliveira-Neto, P.H.A.S. Nogueira e A.R.P. Assumpção, *Rev. Bras. Ens. Fís.* **32**, 1304 (2010).
- [31] J.D. Barrow, *The Constants of nature: the numbers that encode the deepest secrets of the universe* (Pantheon, Cambridge, 2002).
- [32] M. Summerfield, *Programming in Python 3: A complete introduction to the Python language* (Addison-Wesley Professional, Chester, 2010).
- [33] C.C.J. Roothaan, *Rev. Mod. Phys.* **23**, 69 (1951).
- [34] J.C. Slater, *Phys. Rev.* **81**, 385 (1951).
- [35] V. Fock, *Zeitschrift für Physik* **61**, 126 (1930).
- [36] J.D.M. Vianna, A. Fazzio e S. Canuto, *Teoria quântica de moléculas e sólidos: simulação computacional* (Livreria da Física, São Paulo, 2004).
- [37] J.C. Slater, *Quantum theory of matter* (McGraw-Hill, New York, 1968).
- [38] M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G.A. Petersson et al., *Gaussian 09 revision D.01* (Gaussian, Wallingford, 2016).
- [39] F. Weigend e R. Ahlrichs, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **7**, 3297 (2005).
- [40] F. Weigend e R. Ahlrichs, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **8**, 1057 (2006).
- [41] A. Hellweg e D. Rappoport, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 1010 (2015).
- [42] R.D. Johnson, em: *Abstracts of papers of the American Chemical Society* (American Chemical Society, Washington, 2002).
- [43] The Gnuplot development team, *Gnuplot v5.4*, disponível em: <http://www.gnuplot.info/>.
- [44] G. Herzberg, *Molecular spectra and molecular structure. Spectra of Diatomic Molecules* (Van Nostrand Reinhold, New York, 1950), v. 1.
- [45] W. Heitler e F. London, *Zeitschrift für Physik* **44**, 455 (1927).
- [46] J. Rumble (ed.), *CRC handbook of Chemistry and Physics* (CRC Press, Boca Raton, 2017).