

APLICAÇÃO DO ESTUDO DE TUNELAMENTO QUÂNTICO NO DUPLO POÇO POTENCIAL EM DISCIPLINAS DO CURSO DE QUÍMICA

Caio M. Porto*, Nelson H. Morgon

Resumo

Aplicação de ferramentas teóricas-computacionais para o desenvolvimento de um método de ensino de tunelamento quântico mais didático e intuitivo para alunos de graduação e pós graduação.

Palavras-chave:

B3LYP, Tunelamento, Amônia.

Introdução

Tunelamento Quântico (QT) é a capacidade de partículas, ou sistema de partículas, de existir ou atravessar uma região do espaço cuja energia é maior que a energia da partícula, o que seria impossível pela Mecânica Clássica. Traduzindo esse efeito para química, existe uma chance de elétrons, núcleos e átomos tunelarem por uma região classicamente impossível de atravessar. Esse efeito é importante em diversos sistemas, como a cinética química de reações que se desviam do comportamento clássico.

Apesar da importância, os livros mais utilizados no ensino de química quântica falham em apresentar um modelo simples que possa ser facilmente internalizado pelos alunos, não só graduandos como pós-graduandos. O objetivo do trabalho é o desenvolvimento de um método didático para explicar o tunelamento quântico, que possa ser conectado com observáveis, como espectro de Infravermelho, e que seja intuitivo para os alunos.

Resultados e Discussão

A molécula escolhida para servir de base para os trabalhos foi a amônia e derivados, dada a sua clássica inversão com dois poços potenciais. Iniciou-se otimizando e calculando a energia para o estado fundamental e de transição, a partir do qual calculou-se as coordenadas intrínsecas de reação (IRC) para reagentes e produtos (Figura 1). As barreiras em direção a mais e menos infinito foram calculadas aumentando-se a distância entre o átomo de nitrogênio e os de hidrogênio, mantendo-se os ângulos entre os últimos constantes. Todos os cálculos foram realizados utilizando o método B3LYP com base 6-31G no programa GAMESS.

A partir desse ponto, utilizou-se a estratégia desenvolvida por Harmony¹, na qual partindo-se da equação teórica para a diferença de energia entre os níveis desdobrados, Equação (1), substitui-se diretamente as funções de onda para o oscilador harmônico centrado no poço em $x = \Delta$, considerando que a partícula que sofre tunelamento tenha comportamento de oscilador harmônico forte o suficiente no estado fundamental. O resultado é a Equação (2), que relaciona de forma didática parâmetros como massa, frequência vibracional e distância entre poços com o desdobramento de energia.

A Tabela 1 apresenta os resultados para as moléculas de amônia, amônia deuterada e trimetilamina.

Através da energia do desdobramento pode-se calcular a frequência de tunelamento pela relação $\nu_t = 2\Delta E_0/h$

$$E_2 - E_1 = -(\hbar^2/2\pi^2m)\psi_0(0)\psi_0'(0) \quad (1)$$

$$\Delta E_0 = \frac{\hbar\alpha^{3/2}\Delta}{2\mu\pi^{5/2}} \exp(-\alpha\Delta^2) \quad (2)$$

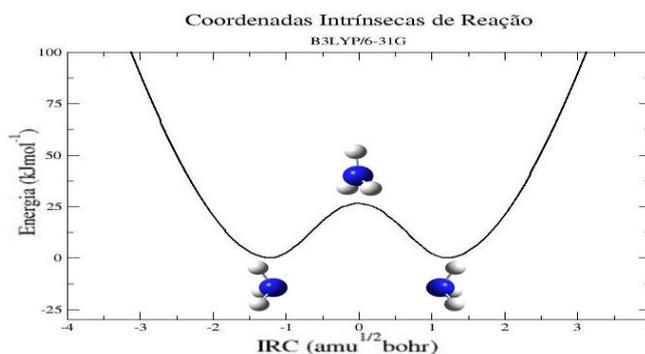


Figura 1. IRC do duplo poço do NH₃.

Tabela 1. Diferença de energia calculada e experimental do desdobramento causado pelo duplo poço potencial nas moléculas estudadas.

Molécula	ΔE_0 calc. (kJmol ⁻¹)	ΔE_0 exp. (kJmol ⁻¹)
NH ₃	$7,77 \times 10^{-4}$	$9,50 \times 10^{-3}$
ND ₃	$1,78 \times 10^{-5}$	$6,34 \times 10^{-4}$
C ₃ H ₉ N	$7,43 \times 10^{-9}$	-

Conclusões

Os resultados apresentam certa divergência em relação aos valores experimentais, condizente com a simplicidade do modelo. Não foram encontrados resultados experimentais para trimetilamina. No entanto a diminuição no desdobramento é razoável com o aumento da massa em relação a NH₃ ou ND₃.

Pode-se perceber uma clara melhora na didática na apresentação de um assunto muitas vezes nebuloso. O trabalho ainda está em andamento e serão realizadas correções pela teoria da perturbação para o tamanho e formato da barreira, e melhora da base utilizada.

Agradecimentos

Os autores agradecem o Instituto de Química pela infraestrutura computacional e CMP ao SAE pela bolsa concedida.

¹ Harmony, M. D. *Chemical Physics Letters* **1971**, 10, 337-340.