



Universidade Federal Rural de Pernambuco
Departamento de Química

Hisia da Silva Cavalcante

**Simulação do Confinamento Eletrônico em
Sistemas Moleculares Utilizando Átomos
Fantasmas**

Recife

2021



Hisla da Silva Cavalcante

Simulação do Confinamento Eletrônico em Sistemas Moleculares Utilizando Átomos Fantasmas

Monografia apresentada ao Departamento de Licenciatura em Química da Universidade Federal Rural de Pernambuco, para a obtenção dos créditos da disciplina de Monografia Lic. em Química e cumprimento do requisito parcial para obtenção do grau de Licenciada em Química.

Orientador: Prof. Dr. Cristiano Costa Bastos

Recife

2021

C376s **Cavalcante, Hisla da Silva**
 Simulação do confinamento eletrônico em sistemas moleculares utilizando átomos fantasma / Hisla da
 Silva Cavalcante. - 2021.
 41 f. ; il.

Orientador: Cristiano Costa Bastos.
Inclui referências.

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) - Universidade Federal Rural de Pernambuco,
Licenciatura em Química, Recife, 2022.

I. confinamento eletrônico. 2. geometria diferencial. 3. nanoestruturas. I. Bastos, Cristiano Costa, orient.
II. Título

CDD 540

Hisla da Silva Cavalcante

Simulação do Confinamento Eletrônico em Sistemas Moleculares Utilizando Átomos Fantasmas

Monografia apresentada ao Departamento de Licenciatura em Química da Universidade Federal Rural de Pernambuco, para a obtenção dos créditos da disciplina de Monografia Lic. em Química e cumprimento do requisito parcial para obtenção do grau de Licenciada em Química.

Trabalho aprovado em 23 de Dezembro de 2021.

COMISSÃO EXAMINADORA

Prof. Dr. Cristiano Costa Bastos
Orientador- Departamento de
Química-UFRPE

Prof. Dr. Luiz Carlos Barbosa da Silva
Departamento de Física de Sistemas
Complexos-IWC

Prof. Dr. Marcilio Martins de Moraes
Departamento de Química-UFRPE

Recife
2021

*Este trabalho é dedicado aos meus pais
e ao meu amado sobrinho, Daniel.*

Agradecimentos

Agradeço a Deus que me permitiu estar aqui, hoje, viva, escrevendo este trabalho. Definitivamente sem Ele tudo isso não seria possível.

Ao professor Cristiano Bastos pela oportunidade de ter feito parte do LnP e ter contribuído na minha construção como futura licenciada em Química. Além das conversas e ensinamentos de vida que com toda certeza me tornaram uma pessoa melhor.

Ao professor João Rufino, por ter me iniciado nos caminhos científicos quando eu ainda era só uma caloura, obrigada pela confiança.

Ao Laboratório Nachbin-Pauling (LnP), por ter feito parte da minha trajetória, por ter disponibilizado suas dependências e equipamentos para o desenvolvimento do meu trabalho. Aos meus amigos e colegas de laboratório Eduardo, Gabriel, Marquito e Andreza que me ajudaram durante o desenvolvimento da minha pesquisa, além é claro dos vários momentos de resenha que compartilhamos. Agradeço também aos funcionários do departamento de química da UFRPE que me auxiliaram de forma indireta e em muitas vezes direta, e esse agradecimento é em especial ao mestre da ordem; seu Davi.

Aos meus pais, que sempre estiveram ao meu lado nos momentos de desespero quando parecia que tudo não iria se resolver. Deram as palavras de incentivo, confiança e os abraços que eu precisava.

Aos meus amigos de vida Itamá, Mirella, Gabriel Gomes, Aryane e Cinthya por compartilharem sonhos, conquistas, medos e por terem sido bons ouvintes nos momentos de alegria mas também nos de aflição.

Aos amigos que conquistei nesses longos anos dentro da universidade, Sara, Alex, Diego, Jhonatan, Hitala, Arthur, Leo, Linda, Milton, Michel e Luan muito obrigada por serem incentivadores ferrenhos, leais e companheiros. As idas ao RU, as calouradas, os choros, as risadas e aos muitos momentos que passamos juntos estão guardadinhos no meu coração e vocês marcaram e fizeram parte do que sou hoje. Essa jornada com certeza teria sido ainda mais árdua sem cada um de vocês.

À Rodrigo Avelino por ter sido a pessoa responsável por ter me ensinado absolutamente tudo que sei dentro de um laboratório experimental, muito obrigada por ser um amigo tão especial e ter me acolhido num dos momentos de maior tristeza da minha vida. Foi uma honra ter compartilhado um pouquinho da vida contigo; uma das pessoas mais maravilhosas que tive o prazer de conhecer nessa vida.

Aos professores Tiago, Ivoneide e Euzébio por todo o conhecimento compartilhado, amizade e as várias conversas de incentivo quando minha única vontade era desistir.

As minhas grandes amigas Mariana, Rayane e Juliana por terem sido meu porto seguro durante esses anos. Obrigada pelos rolês, pelo companheirismo, pela lealdade, pelas conversas incríveis e por fazerem tudo que está ao alcance de vocês para me ajudar nos momentos de ansiedade e tristeza. Por sempre acreditarem em mim, mesmo quando eu mesma não o fazia, e me incentivarem a sonhar muito alto. Compartilhar a vida com vocês é indiscutivelmente uma das melhores coisas que tenho, sei que posso contar com vocês pra tudo.

Ao meu sobrinho Daniel que nos dias de maiores tristezas foi a única pessoa nessa dimensão capaz de tornar meu dia melhor. Tu enche minha vida de muito amor, perguntas difíceis e muitas conversas.

À Rameez por todo companheirismo, pelos sonhos, pelas longas ligações e por acreditar que sou capaz de conseguir tudo que desejar.

*"Every path is the right path.
Everything could've been anything else.
And it would have just as much meaning."
(Mr. Nobody)*

Resumo

Percebendo a diversidade de uso das nanoestruturas em gerar compostos com geometrias diversificadas e bem precisas, fazer uso de abordagens que incluam componentes de geometria diferencial parece um caminho razoável. Por essa ótica, empregamos o confinamento eletrônico em nanoestruturas através das abordagens computacional, intrínseca e extrínseca, pelos quais permitem estudos preliminares no desenvolvimento de novos dispositivos eletrônicos de maior sofisticação. Este trabalho, portanto, busca estudar o confinamento de 1 e 2 elétrons em estruturas unidimensionais (lineares, circulares, lineares com curvas e similares a parábolas), analisar seus espectros energéticos, as distribuições de carga a partir de simulações computacionais e compará-los com modelos teóricos. Apresentamos resultados de distribuição de cargas que demonstraram ser adequados aos modelos teóricos.

Palavras-chave: confinamento eletrônico, geometria diferencial, nanoestruturas.

Abstract

Realizing about diversity of nanostructures use in generating compounds with diversified and very precise geometries, making use of approaches that include differential geometry components seems a reasonable path. From this perspective, we employ electronic confinement in nanostructures through computational, intrinsic and extrinsic approaches, which allow preliminary studies in the development of new electronic devices of greater sophistication. This work, therefore, seeks to study the confinement of 1 and 2 electrons in one-dimensional structures (linear, circular, linear with curves and similar to parabolas), analyze their energy spectra, charge distributions from computer simulations and compare them with theoretical models. We present load distribution results that proved to be adequate for theoretical models.

Keywords: electronic confinement, differential geometry, nanostructures.

Lista de Figuras

Figura 1 – Vetor velocidade ($\dot{\beta}$) e aceleração ($\ddot{\beta}$) em um círculo.	14
Figura 2 – Alguns sistemas usados para o confinamento eletrônico.	21
Figura 3 – Regiões do confinamento eletrônico em sistemas lineares.	22
Figura 4 – Distribuição de carga nos sistemas lineares.	23
Figura 5 – Gráficos comparativos entre as energias computacional e teórica intrínseca em sistemas lineares.	23
Figura 6 – Regiões de confinamento em sistemas com geometria em T.	24
Figura 7 – Distribuição de carga em sistemas com geometria em T.	24
Figura 8 – Distribuições de carga nas geometrias em T com a reta horizontal deslocada.	24
Figura 9 – Gráficos comparativos entre as energias computacional e teórica intrínseca em sistemas lineares com retas conectadas.	25
Figura 10 – Regiões do confinamento eletrônico em sistemas circulares.	25
Figura 11 – Distribuições de carga nos sistemas circulares.	26
Figura 12 – Gráficos comparativos entre as energias computacional e teórica intrínseca em sistemas lineares com retas conectadas.	26
Figura 13 – Regiões do confinamento eletrônico em sistemas parabólicos.	27
Figura 14 – Distribuição de carga para os sistemas parabólicos suaves.	27
Figura 15 – Gráficos comparativos entre as energias computacional e teórica intrínseca.	28
Figura 16 – Gráficos comparativo entre as energias computacional e intrínseca teórica entre os sistemas lineares e parabólicos suave.	29
Figura 17 – Distribuição de carga em sistemas parabólicos retos no confinamento de 1 elétron.	29
Figura 18 – Gráficos comparativos entre as energias computacional e teórica intrínseca em parábolas retas.	30
Figura 19 – Regiões do confinamento eletrônico em sistemas lineares com curvas.	30
Figura 20 – Distribuições de cargas em sistemas lineares com curvas no meio no confinamento de 1 elétron.	31
Figura 21 – Gráficos comparativos entre as energias computacional e teórica intrínseca em sistemas lineares com curvas meio.	31
Figura 22 – Distribuições de carga em sistemas lineares com curvas ponta.	32
Figura 23 – Gráficos comparativos entre as energias computacional e teórica intrínseca em sistemas lineares com curvas ponta.	32
Figura 24 – Distribuições de carga no confinamento de 2 elétrons em sistemas lineares.	33

Figura 25 – Gráfico das energias computacionais nos sistemas lineares para o confinamento de 2 elétrons.	34
Figura 26 – Distribuições de carga em sistemas lineares com retas conectadas para o confinamento de 2 elétrons.	34
Figura 27 – Gráfico das energias computacionais nos sistemas lineares com geometria T para o confinamento de 2 elétrons.	35
Figura 28 – Distribuição de carga em sistemas circulares no confinamento de 2 elétrons.	35
Figura 29 – Gráfico das energias computacionais nos sistemas circulares para o confinamento de 2 elétrons.	36
Figura 30 – Distribuições de carga em sistemas similares aos parabólicos no confinamento de 2 elétrons.	36
Figura 31 – Gráfico das energias computacionais nos sistemas similares aos parabólicos no confinamento de 2 elétrons.	37
Figura 32 – Distribuições de carga em sistemas lineares com curvas no confinamento de 2 elétrons.	37
Figura 33 – Gráfico das energias computacionais em sistemas lineares com curvas no confinamento de 2 elétrons.	38

Sumário

1	INTRODUÇÃO	13
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	14
2.1	Fundamentos de geometria diferencial	14
2.1.1	Curvas	14
2.2	Mecânica Quântica	15
2.3	Teoria do Orbital Molecular	16
2.3.1	Método de Hartree-Fock-Roothaan	16
2.3.2	Conjunto de Base	18
3	OBJETIVOS	20
3.1	Objetivo Geral	20
3.2	Objetivos Específicos	20
4	METODOLOGIA	21
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	22
5.1	Confinamento de 1 elétron	22
5.1.1	Lineares	22
5.1.2	Circulares	25
5.1.3	Similares a parábolas	27
5.1.4	Lineares com curvas	29
5.2	Confinamento de 2 elétrons	33
5.2.1	Lineares	33
5.2.2	Circulares	35
5.2.3	Similares aos Parabólicos	35
5.2.4	Lineares com curvas	37
6	CONSIDERAÇÕES FINAIS	39
	REFERÊNCIAS	40

1 Introdução

Nanoestruturas são compostos que podem ser definidos por apresentarem medidas em ordem nanométrica (10^{-9}). No campo da Química as estruturas mais pesquisadas são os nanotubos de carbono, nanocristais, *quantum dots*, nanocapsúlas e os dendrímeros (CARVALHO; REIS; OLIVEIRA, 2020), devido ao conjunto variado de propriedades físico-químicas e diversidade em suas aplicações. Destas, ainda é provável obter compostos 1D que apresentem alto potencial de confinamento eletrônico, além da versatilidade em coordenar propriedades elétricas, magnéticas e ópticas, como nanofios de selênio (XIA et al., 2003), nanocristais de silício (EKONG; OSIELE, 2016), etc. Esses nanomateriais apresentam diversas aplicações, que partem dos dispositivos eletrônicos e vão até a medicina e o desenvolvimento de medicamentos (BARANWAL et al., 2018). Então, o estudo de modelos que assemelhem-se a estes pode contribuir na compreensão dessa categoria de materiais.

O estudo do confinamento eletrônico em nanoestruturas através da geometria diferencial tornou-se alvo do interesse de pesquisadores, possibilitando o desenvolvimento de novos instrumentos de estudo de sistemas quânticos. Modelagens computacionais atreladas à geometria diferencial parecem ser relevantes para estabelecer relações entre a química computacional e a matemática. Particularidades das nanoestruturas podem ser associadas à cálculos computacionais característicos a estas estruturas (KHAKPOOR, 2016) e com a geometria diferencial de curvas. Os espectros energéticos e informações relacionadas podem ser estudados a partir da equação de Schrödinger, um dos prováveis tratamentos é o que se refere à modelagem do operador Hamiltoniano. Na abordagem mais trivial o hamiltoniano é construído desvinculado do ambiente no entorno. Em contrapartida, a abordagem extrínseca considera a região nas adjacências do sistema, neste caso o hamiltoniano depende diretamente da curvatura associada (DA SILVA; BASTOS; RIBEIRO, 2017). Cálculos do tipo Hartree-Fock se mostraram precisos no estudo das distribuições eletrônicas nos sistemas físicos adotados. Estudamos sistemas quânticos inclusos no espaço 1D (DA COSTA, 1981) no confinamento de 1 e 2 elétrons.

Na primeira seção deste trabalho foi investigado o comportamento eletrônico de uma série de curvas similares a nanoestruturas através das perspectivas intrínseca e extrínseca para o confinamento de 1 elétron, e na segunda seção estudamos as mesmas abordagens para o confinamento de 2 elétrons.

2 Fundamentação Teórica

2.1 Fundamentos de geometria diferencial

Nesta seção iremos abordar os principais elementos de geometria diferencial. De modo geral, iremos verificar o estudo de curvas descritas por funções diferenciáveis sem o rigor de suas definições (CARMO, 2016).

2.1.1 Curvas

Seja uma curva parametrizada $\beta : I \rightarrow \mathbb{R}^3$, onde

$$t \in I \mapsto \beta(t) = (x(t), y(t), z(t)) \in \mathbb{R}^3$$

neste exemplo a variável t é designada como o parâmetro da curva.

Uma forma de determinar essa curva é através de seu vetor velocidade $\dot{\beta}(t)$, sendo tangente a curva e a $\ddot{\beta}(t)$ temos o vetor aceleração. E a equação sendo denotada por: $\beta(t) = (A \cos(t), A \sin(t), 0)$.

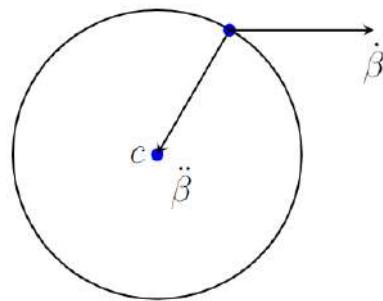


Figura 1 – Vetor velocidade ($\dot{\beta}$) e aceleração ($\ddot{\beta}$) em um círculo.

Além dessa interpretação, poderíamos parametrizar a curva novamente da seguinte forma:

$$\vec{\beta}(s) = A (\cos(s/A), \sin(s/A), 0)$$

Partindo do mesmo pressuposto da parametrização anterior, então teríamos que:

$$\dot{\vec{\beta}}(s) = (-\sin(s/A), \cos(s/A), 0),$$

$$\ddot{\vec{\beta}}(s) = -1/A(\cos(s/A), \sin(s/A), 0).$$

Através dessa parametrização a norma desses vetores é:

$$\|\dot{\vec{\beta}}(s)\| = \sqrt{-\operatorname{sen}^2(s/A) + \operatorname{cos}^2(s/A)} = 1,$$

$$\|\ddot{\vec{\beta}}(s)\| = -1/A \sqrt{\operatorname{cos}^2(s/A) + \operatorname{sen}^2(s/A)} = -1/A.$$

Portanto, o vetor velocidade $\|\dot{\vec{\beta}}(s)\|$ é unitário. Assim, podemos dizer que a curva é parametrizada por comprimento de arco (p.c.a).

$$\kappa(s) = \|\ddot{\vec{\beta}}(s)\|$$

Desta forma, somos apresentados ao conceito de curvatura, como sendo a variação da direção do vetor tangente, ou seja, ela mede o quanto uma curva se distingue de uma reta (uma vez que a curvatura da reta é nula) através do seu vetor tangente.

2.2 Mecânica Quântica

A equação de Schrödinger é usada para descrever sistemas microscópicos ([SCHRODINGER, 1926](#)), sua forma geral, independente do tempo e unidimensional é

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \quad (2.1)$$

onde \hat{H} é o operador Hamiltoniano, (Ψ) é a função de onda e E é o espectro do sistema ([GRIFFITHS, 2018](#)). O Hamiltoniano também pode ser escrito como

$$\hat{H} = T + V \quad (2.2)$$

sendo T a energia cinética do sistema e V a energia potencial. O confinamento de uma partícula é em geral a restrição espacial para seu deslocamento, com ou sem a ação de um campo externo. Assim, uma partícula livre teria seu Hamiltoniano e consequentemente o espectro reduzido à energia cinética.

Diferentes tratamentos geométricos podem levar à diferentes hamiltonianos de confinamento, o que em princípio evidencia o problema em qual escolha devemos fazer para a modelagem do confinamento ([DA SILVA; BASTOS; RIBEIRO, 2017](#)). As abordagens geométricas podem ser intrínseca ou extrínseca. A abordagem intrínseca impõe que existe apenas a região espacial de confinamento não precisando fazer referência a nenhum tipo de força ou potencial de confinamento, como ainda é comum

nos livros didáticos. O hamiltoniano neste caso é puramente cinético, considerando a região unidimensional como uma curva suave ele é dado por

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{ds^2} \quad (2.3)$$

onde \hbar é a constante de reduzida Planck, μ é a massa real da partícula e s é o comprimento de arco.

Nas abordagens extrínsecas além da região de confinamento se considera o ambiente a qual está imersa. Neste caso é necessário a força externa para simular a restrição da partícula nesta região que, dependendo da forma do potencial de confinamento, resulta em diferentes hamiltonianos contendo um potencial geométrico além do termo cinético. Um tratamento bastante utilizado é o de Da Costa em que ele faz uso de um potencial quadrático para o confinamento, resultando no seguinte hamiltoniano

$$H_{dec} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{ds^2} - \frac{\hbar^2}{8\mu} \kappa(s)^2 \quad (2.4)$$

onde, s é o parâmetro de comprimento de arco da curva e $\kappa(s)$ é a curvatura da curva.

2.3 Teoria do Orbital Molecular

Nesta seção iremos abordar os conceitos da teoria do orbital molecular. Usando métodos desenvolvidos na mecânica quântica, foi possível desenvolver a teoria dos orbitais moleculares (MO) sendo uma alternativa de visualizar ligações em moléculas, obter energias e funções de onda (BALLHAUSEN, 1965).

2.3.1 Método de Hartree-Fock-Roothaan

Por volta da metade do século XX, foi introduzido por Hartree o método do campo autoconsistente para o cálculo aproximado de funções de onda e de energias para átomos e moléculas. O método se baseia da seguinte forma: não serão consideradas todas as interações simultâneas entre os elétrons do sistema, supondo que o potencial que atua nos elétrons se origina 1) dos núcleos e 2) da distribuição de carga média sobre os demais elétrons (LEVINE, 2000).

Para os átomos que apresentam camada de valência fechadas essa distribuição é esférica, e o modelo que melhor se aplica é o de *campo médio*, assim um

campo atuando sobre um elétron em \vec{r}_i , é dependente da distribuição de carga média dos outros elétrons que possuem a seguinte forma:

$$V_{repulsão}(\vec{r}_i) = \int \Psi^* \frac{1}{r_{ij}} \Psi d\tau \quad (2.5)$$

isto é, o campo está definido em termos de autofunção, esta sendo a própria variável. O problema tem como solução um método correspondente: defini-se uma distribuição eletrônica predeterminada que seja possível calcular o potencial aproximado, então monta-se o Hamiltoniano aproximado e por fim temos as soluções. O desempenho da nova $\Psi(r)$ é aparentemente melhor que a primeira; o campo criado a partir dela resulta no atual hamiltoniano cujas soluções originam o novo campo, esse processo se repete até que o campo seja autoconsistente, ou seja, o potencial calculado em duas interações consecutivas precisa ser constante dentro dos limites pré determinados.

Assim, a $\Psi(r)$ para cada elétron num sistema com N elétrons é:

$$\Psi(r) = \Psi_1(r_1)\Psi_2(r_2)\Psi_3(r_3)\Psi_4(r_4) = \sum_i^N \Psi_i(r_i) \quad (2.6)$$

Esse produto é conhecido por *produto de Hartree*, usando a Eq. 2.6 na equação de Schrödinger é possível separar em N equações independentes para cada elétron do sistema.

Em anos posteriores do mesmo século, Slater e Fock autonomamente mostraram que o método de Hartree apresentava inconsistências e não levava em consideração o princípio da antissimetria da função de onda. No método de Hartree foi utilizado o princípio da exclusão de Pauli, na sua antiga versão que proibia a existência de dois elétrons compartilhando o mesmo estado quântico. Desse modo, no lugar de orbitais espaciais Slater e Fock usaram combinação linear antissimétrica para a obtenção dos *spin-orbitais*, essa análise foi realizada através do determinante de Slater. A teoria do campo auto-consistente que faz uso da antissimetria do spin-orbital é chamada de cálculo de Hartree-Fock.

A equação diferencial para encontrar os orbitais de Hartree-Fock tem a seguinte forma:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu_e} \nabla_i^2 + V_i(r_i) \right] u_i = \epsilon_i u_i \quad (2.7)$$

onde u_i é o enésimo *spin-orbital* o hamiltoniano acima é conhecido como o operador de Fock ou Hartree-Fock e seu autovalor ϵ_i é a energia do orbital do *spin-orbital* i e μ_e é a massa do elétron.

Em meados de 1951, Roothaan propôs que as funções que representavam os orbitais moleculares conseguiriam ser adquiridas em termos de funções que pudessem representar os orbitais atômicos (ROOTHAAN, 1951). Levando em consideração que orbitais atômicos em sistemas polieletônicos são funções aproximadas, a mesma concepção poderia ser aplicada para construção dos orbitais a partir de funções matemáticas que admitissem computacionalmente cálculos de propriedades atômicas e moleculares com alto nível de precisão. O método descrito se popularizou como o método de combinação linear de orbitais atômicos (Linear Combination of Atomic Orbitals-LCAO).

2.3.2 Conjunto de Base

Roothaan e Hall reformularam as equações de Hartree e Fock com o intuito de obter soluções numéricas. O método consiste em introduzir um conjunto de funções de base normalizadas na equação Hartree-Fock. Para expandir a parte espacial dos spin-orbitais. O problema então fica resumido a uma mera diagonalização matricial. A forma espacial dos orbitais pode ser representada por uma combinação linear de K funções de base monoeletônicas, como segue:

A remodelagem feita por Roothaan e Hall nas equações de Hartree-Fock tinham a finalidade de obter soluções numéricas. O método se fundamenta em inserir um conjunto de funções de base normalizadas no operador de Hartree-Fock, com a finalidade de expandir o termo espacial dos spin-orbitais, então, o problema se resume a uma simples diagonalização matricial. É possível representar a geometria espacial dos orbitais através de uma combinação linear de K funções de base monoeletônicas como:

$$\phi_p(r) = \sum_{v=1}^K C_{vp} G_v(r) \quad (2.8)$$

onde, K é o número de funções do conjunto e os C_{vp} são coeficientes a serem determinados ou simplesmente os coeficientes dos orbitais moleculares.

Como a função de onda é capaz de ser representada por uma combinação linearmente independente de K funções de base compõem a função de onda total, então temos que a equação de Hartree-Fock é:

$$\sum_v F_{\mu v} C_{vp} = \epsilon_p \sum_v S_{\mu v} C_{vp} \quad (2.9)$$

A partir das definições anteriormente determinadas, Pople (1981) desenvolveu uma nova categoria de funções de base conhecidas por funções de polarização, sendo

elas a 6-31G e 6-311G. Estas são Gaussianas de segunda ordem para compostos não hidrogenados.

3 Objetivos

3.1 Objetivo Geral

Estudar o confinamento eletrônico em moléculas e nanoestruturas a partir de modelagens intrínseca e extrínseca para a equação de Schrödinger unidimensional.

3.2 Objetivos Específicos

- Construir modelos moleculares com funções de onda atômicas mas sem núcleos e contendo apenas 1 ou 2 elétrons;
- Estudar o espectro e a distribuição eletrônica de 1 ou 2 elétrons em regiões geométricas distintas;
- Comparar os modelos de confinamento intrínseco e extrínseco.

4 Metodologia

O confinamento eletrônico numa dada região pode ser estudado a partir das abordagens intrínseca e extrínseca em partículas não-interagentes, com isto vêm sendo possível simular o transporte eletrônico em moléculas e nanoestruturas indicando possíveis dispositivos a serem sintetizados (DA SILVA; BASTOS; RIBEIRO, 2017).

Adotamos a abordagem intrínseca e a extrínseca de Da Costa para o confinamento em curvas. Também realizamos cálculos do tipo Hartree-Fock visando a comparação entre essas modelagens. É possível montar modelos moleculares com átomos fantamas, onde ficam apenas as funções gerando uma função molecular para a região delimitada (Fig. 2).



Figura 2 – Alguns sistemas usados para o confinamento eletrônico.

Ainda não existe uma dedução a partir do tratamento de Da Costa para o caso de partículas confinadas interagentes.

Os cálculos computacionais e a construção das estruturas foi realizada utilizando o software Gaussian 09 (FRISCH et al., 2009). Para a montagem das estruturas escolhidas, os átomos foram distribuídos com distâncias de ligação de 1,54 Å, esta é a distância típica de uma ligação simples carbono-carbono (artigo basis set 2004). A função de onda utilizada para os átomos fantamas foi a 6-311+G(d), bastante adequada e robusta para os objetivos.

5 Resultados e Discussão

Consideramos o problema do confinamento de elétrons não interagentes em curvas. Para início desse estudo optamos por modelar sistemas lineares, circulares e similares a parábolas e cúbicas. Inicialmente, as estruturas foram construídas através do Gauss View 5 e em seguida os cálculos computacionais foram realizados utilizando o software *Gaussian 09* ([FRISCH et al., 2009](#)). O nível de cálculo aplicado foi o Hartree-Fock 6-311+g(d) em todas as estruturas estudadas.

5.1 Confinamento de 1 elétron

Discutimos nesta seção o confinamento de 1 elétron em algumas abordagens analíticas e computacional. Este tipo de estudo está na descrito na literatura e tem interesse para o entendimento no transporte eletrônico de moléculas e nanoestruturas ([KHAPOOR, 2016](#)) ([SANTOS et al., 2016](#)) ([BASTOS; PAVÃO; LEANDRO, 2016](#)).

5.1.1 Lineares

Inicialmente consideramos o confinamento eletrônico em sistemas lineares, intervalo de reta. (Fig. 3). Variamos os números de centros de 3 à 60.



(a) Região linear com 10 centros.

(b) Região linear com 35 centros.

Figura 3 – Regiões do confinamento eletrônico em sistemas lineares.

Nesses sistemas o elétron foi localizado na região central de cada curva. O tamanho das retas não influenciou nessa tendência, embora a distribuição de carga tenha variado a medida que os centros foram adicionados às estruturas (Fig. 5a). Além disso, a região de maior intensidade eletrônica se encontrou num comprimento 13,9 Å a partir de 30 centros. O comportamento apresentado concordou com a abordagem intrínseca, que prevê o elétron se concentrando na região central das curvas independente de suas geometrias. Nesse caso em especial, a interpretação através da perspectiva extrínseca é igual a intrínseca.

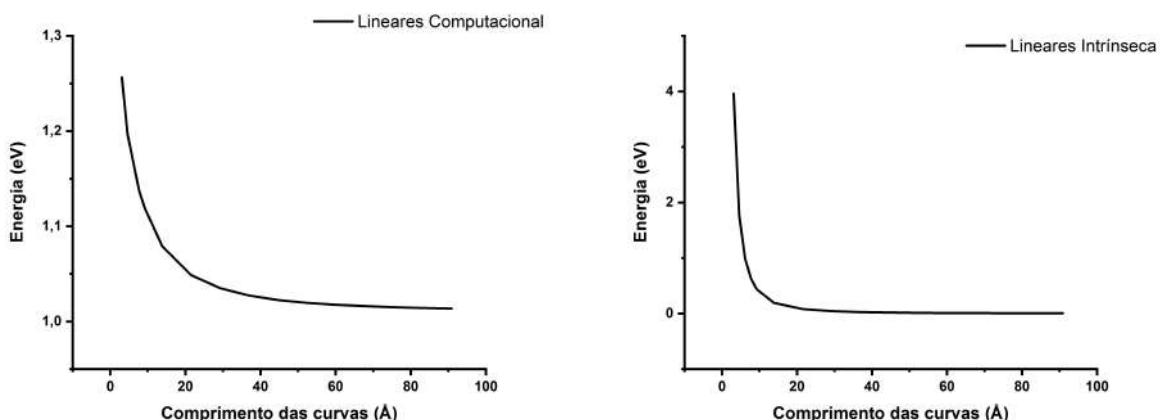


(a) Região linear com 10 centros.

(b) Região linear com 35 centros.

Figura 4 – Distribuição de carga nos sistemas lineares.

A energia calculada nos sistemas lineares encontrou-se próxima de 1,02 eV (Fig. 5) a partir de 30 centros (equivalente à 44,66 Å). Apesar deste valor para a energia ser superior ao esperado para o modelo intrínseco analítico o comportamento eletrônico obtido computacionalmente está em concordância. Neste caso, a modelagem descrita por (DA COSTA, 1981) coincidiu com o modelo intrínseco de confinamento.



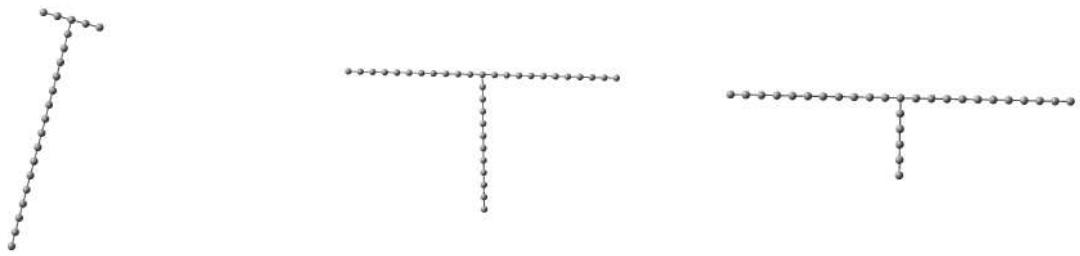
(a) Energias computacionais em sistemas lineares no confinamento de 1 elétron.

(b) Energias teórica intrínseca em sistemas lineares no confinamento de 1 elétron.

Figura 5 – Gráficos comparativos entre as energias computacional e teórica intrínseca em sistemas lineares.

Em sistemas com duas retas conectadas (formando uma geometria similar a um T) a adição dos centros foi realizada de 3 maneiras distintas (Fig. 6): de forma simétrica onde adicionamos igualmente centros em cada extremidade das retas (TS), fixando a reta horizontal e adicionando centros apenas na vertical (THF) e por fim inserindo centros nas pontas da reta horizontal e a vertical permanecendo fixa (TVF).

Em todos os sistemas o elétron se situou na região entre os ângulos de 90º formados pela interseção das retas. De acordo com esse comportamento poderíamos afirmar que as extremidades das retas impuseram ao elétron ser encontrado exatamente na convergência entre elas, assim como ocorre num poço de potencial.



(a) THF com 16 centros. (b) TS com 34 centros. (c) TVF com 28 centros.

Figura 6 – Regiões de confinamento em sistemas com geometria em T.

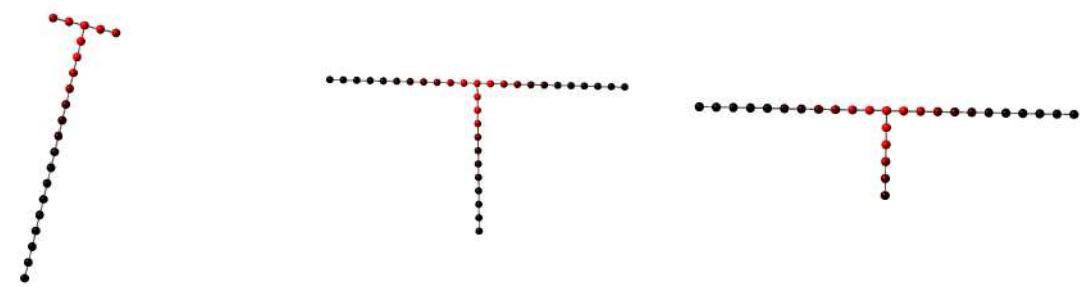


Figura 7 – Distribuição de carga em sistemas com geometria em T.

Supondo que a região entre os ângulos retos apresentaram a maior curvatura nessas curvas, os sistemas estariam então em concordância com as interpretações intrínseca e também com a extrínseca adotada (isto sendo verdade apenas para a suposição feita).

E quando as retas horizontais são transladadas para regiões mais abaixo nas retas verticais é possível observar que as distribuições eletrônicas ainda apresentam as mesmas tendências. Então, para essas geometrias a concentração de carga esteve continuamente nos locais em que há a formação de ângulos de 90º (Fig.8).

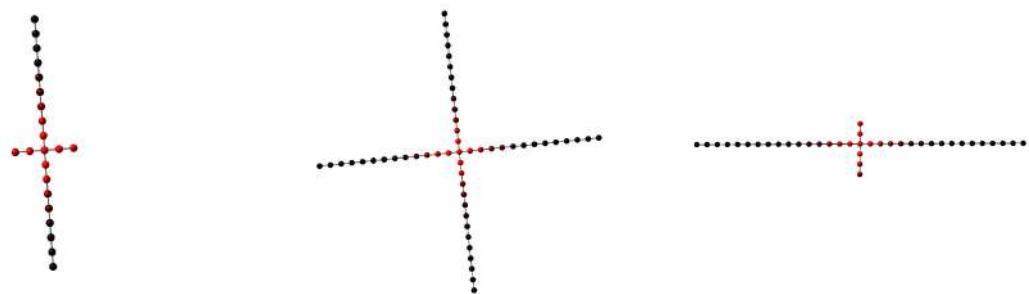
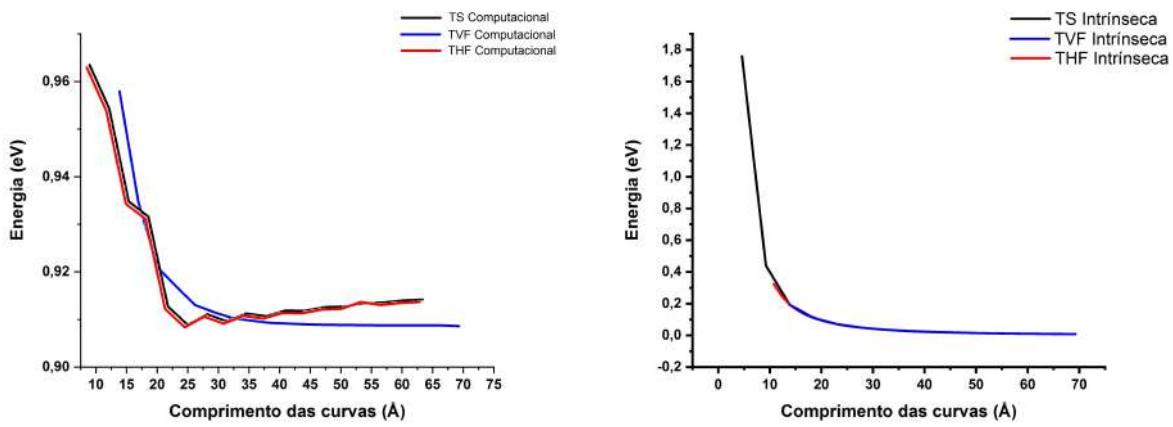


Figura 8 – Distribuições de carga nas geometrias em T com a reta horizontal deslocada.

As energias nos sistemas TS e THF variaram em torno de 0,90 e 0,97eV (Fig. 9) e mostraram praticamente o mesmo comportamento gráfico. É possível notar ainda que a partir de 40Å as energias se mantiveram por volta de 0,90eV em ambas geometrias. Para os sistemas TVF os espectros variaram entre 0,96 e 0,90eV, e aproximadamente a partir de 35Å os espectros divergiram em escalas de meV (Fig. 9).



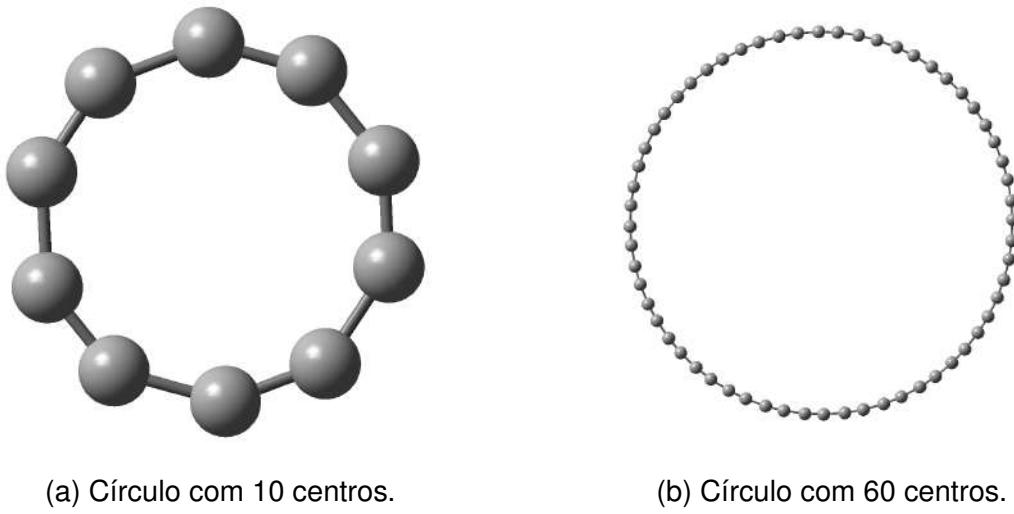
(a) Energias computacionais em sistemas lineares com 2 retas conectadas no confinamento de 1 elétron.

(b) Energias teórica intrínseca em sistemas lineares com 2 retas conectadas no confinamento de 1 elétron.

Figura 9 – Gráficos comparativos entre as energias computacional e teórica intrínseca em sistemas lineares com retas conectadas.

5.1.2 Circulares

Para os sistemas circulares as estruturas foram previamente otimizadas (Fig. 10) e então calculadas como as demais curvas.



(a) Círculo com 10 centros.

(b) Círculo com 60 centros.

Figura 10 – Regiões do confinamento eletrônico em sistemas circulares.

Nos sistemas circulares as distribuições de carga foram uniformes ao longo de toda região do confinamento (Fig. 11), esse comportamento pode ter sido devido a alta simetria encontrada nessa geometria. Nesses modelos o comportamento eletrônico observado concordou com as abordagens de confinamento intrínseco e extrínseco

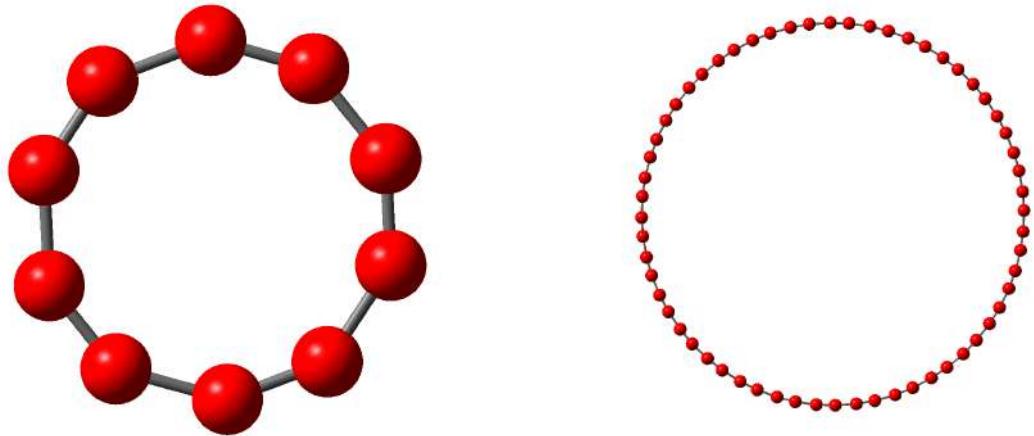
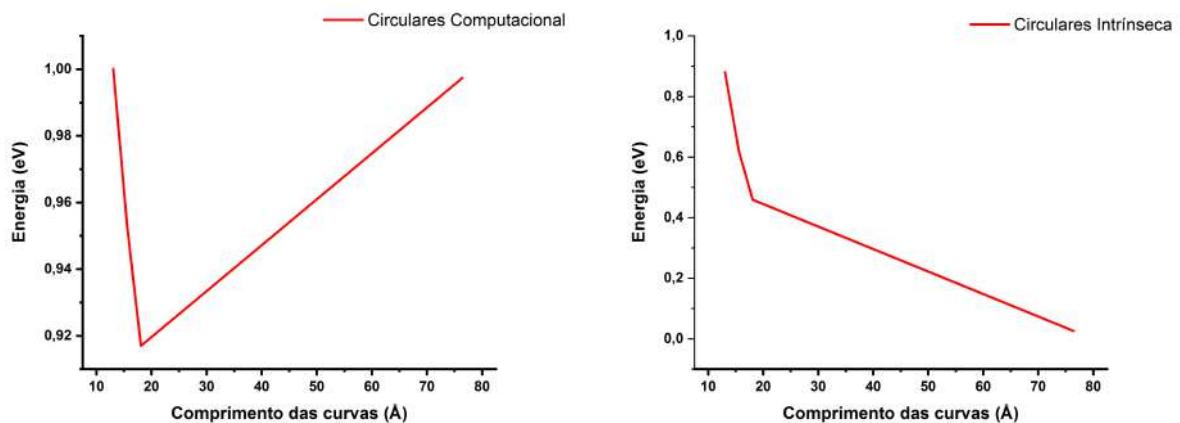


Figura 11 – Distribuições de carga nos sistemas circulares.

As energias calculadas variaram em escalas de milieV embora os valores tenham sido próximos de 1,00eV (Fig. 12a). Enquanto que as energias intrínsecas diminuíram de 1eV para a ordem de milieV e se comparadas com os espectros intrínsecos dos sistemas lineares os valores chegam a ser 4 vezes menores (Fig. 12b).

Por essa razão, o modelo intrínseco de confinamento parece descrever melhor os espectros nos modelos circulares, visto que nesses sistemas as energias precisariam diminuir com o aumento dos comprimentos das curvas.



(a) Energias computacionais em sistemas circulares no confinamento de 1 elétron. (b) Energias teórica intrínseca em sistemas circulares no confinamento de 1 elétron.

Figura 12 – Gráficos comparativos entre as energias computacional e teórica intrínseca em sistemas lineares com retas conectadas.

5.1.3 Similares a parabólas

Para a construção dos sistemas similares aos parabólicos; aqui iremos tratar apenas como parábolas para simplificar a discussão, duas interfaces distintas foram adotadas. A primeira apresentando uma geometria mais suave (PS) (Fig.13a), enquanto a segunda assemelha-se a um imã (PR) (Fig.13b).

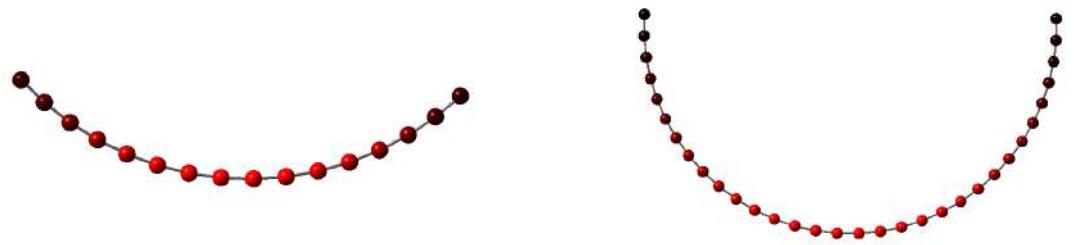


(a) Parabolas suave com 34 centros.

(b) Parabolas reta com 55 centros.

Figura 13 – Regiões do confinamento eletrônico em sistemas parabólicos.

Nos modelos de PS o elétron foi detectado na região de maior curvatura nas curvas (área de maior intensidade em vermelho) (Fig.14). A partir de 20 centros a variação das distribuições de carga se mantiveram no que correspondeu a região em torno do comprimento de 13,86Å à 16,94Å.

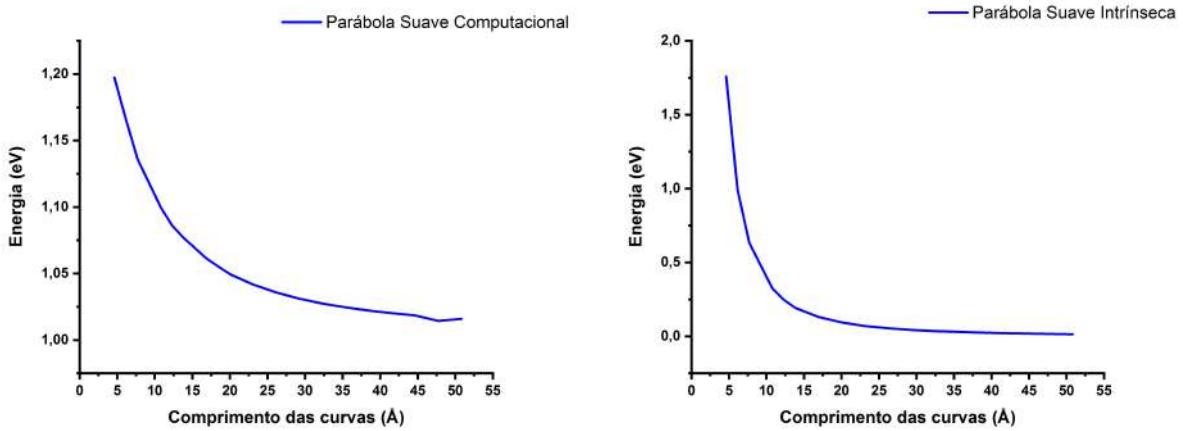


(a) Região parabólica suave com 16 centros. (b) Região parabólica suave com 34 centros.

Figura 14 – Distribuição de carga para os sistemas parabólicos suaves.

As distribuições de carga nas séries parabólicas suaves se mostraram análogas aos sistemas lineares. Foi visto que independente do aumento dos comprimentos das estruturas a concentração das cargas permaneceram na região central, que também é a de maior curvatura dos modelos. Dessa forma, o comportamento eletrônico

concordou tanto com a abordagem intrínseca quanto com a relatada por (DA COSTA, 1981).



- (a) Gráfico das energias computacionais no confinamento de 1 elétron em parábolas suaves.
 (b) Gráfico das energias teórica intrínseca no confinamento de 1 elétron em parábolas suaves.

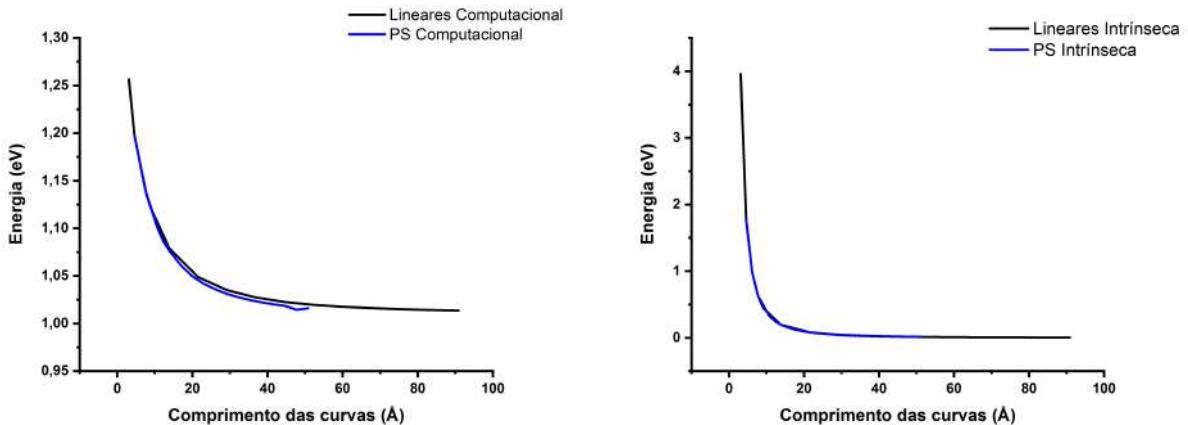
Figura 15 – Gráficos comparativos entre as energias computacional e teórica intrínseca.

As energias computacionais se mantiveram próximas de 1,0235eV a partir de 20 centros correspondendo ao comprimento de 29,26Å (Fig. 15a). Considerando a curva com 20 centros, apenas 7 deles conseguiram localizar a carga do elétron, nesse caso as energias no modelo intrínseco teórico seriam 0,4396eV (Fig. 15b).

Embora este valor tenha sido menor que o obtido computacionalmente é maior que o previsto por (DA COSTA, 1981). Além disso, os espectros computacional e intrínseco teórico nestes modelos foram análogos aos sistemas lineares em ambas as abordagens (Fig. 16).

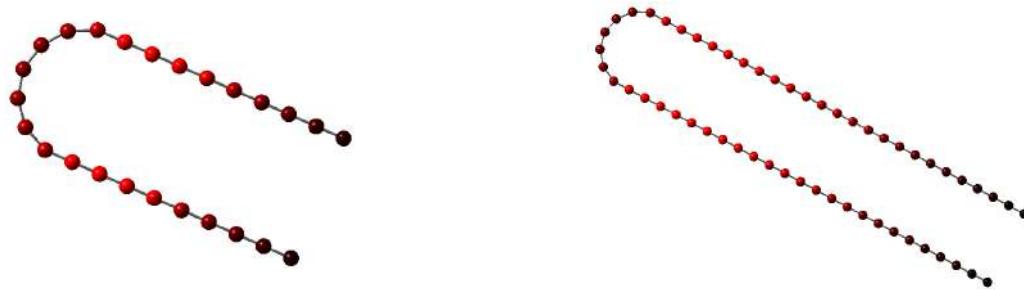
Nas parábolas retas, o elétron foi localizado nas regiões lineares das estruturas onde a curvatura é igual a 0. Neste caso, as distribuições de carga se intensificaram nas regiões *flat* correspondendo as regiões entre 7,7Å e 29,26Å de acordo com o aumento dos centros nas curvas (Fig. 17). O comportamento eletrônico observado se aproximou da modelagem intrínseca, uma vez que o elétron se posicionou na região central das retas. Assim, nestes sistemas a abordagem descrita por Da Costa não se aplicou.

Os espectros computacionais oscilaram entre 1,25eV e 0,84eV até as estruturas de comprimento de 36,96Å e a partir de 45Å (correspondente a 30 centros) as energias variaram em escala de meV e apresentaram uma média em torno de 0,8187 eV (Fig. 18a). Enquanto as energias intrínseca diminuíram de 4eV para a grandeza de meV por volta de 20Å em diante, ao passo que os comprimentos dos modelos aumentavam (Fig. 18b).



(a) Espectros computacionais dos sistemas li-(b) Espectros teórico intrínseco dos sistemas li-neares e das PS.

Figura 16 – Gráficos comparativo entre as energias computacional e intrínseca teórica entre os sistemas lineares e parabólicos suave.



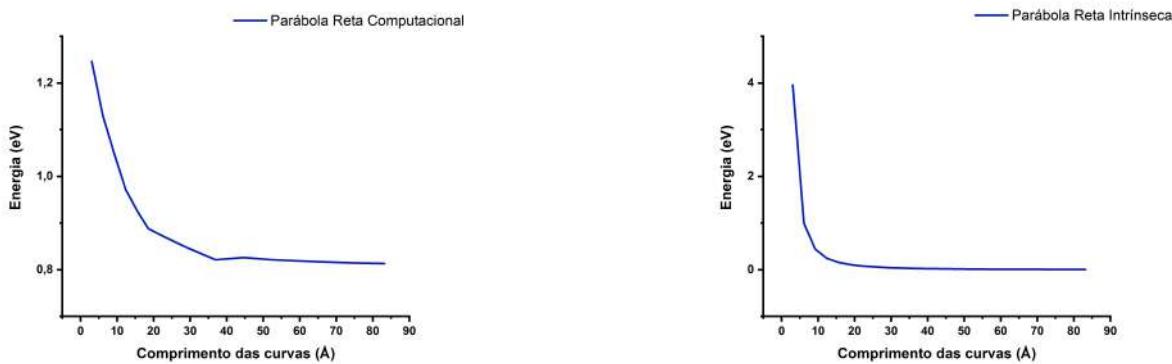
(a) Região parabólica reta com 25 centros. (b) Região parabólica reta com 55 centros.

Figura 17 – Distribuição de carga em sistemas parabólicos retos no confinamento de 1 elétron.

5.1.4 Lineares com curvas

Finalmente, nos sistemas lineares com curvas assim como nos parabólicos foram escolhidas duas formas de montagem das estruturas: 1. fixando as pontas e variando os átomos no meio (LCM) (Fig. 19a) e 2. fixando os átomos centrais e adicionando-os as pontas (LCP) (Fig. 19b).

Assim, para as estruturas lineares com curvas em que os centros foram adicionados ao meio a densidade eletrônica se localizou nas regiões curvas independente do comprimento (Fig. 20a). Para os modelos até 20 centros as distribuições de carga se espalharam ao redor da curva 1 (à esquerda), esse comportamento é ainda mais evidenciado para as estruturas de maior extensão (Fig. 20b).



(a) Energias computacionais no confinamento de 1 elétron em sistemas parabólicos retos.

(b) Energias teórica intrínseca no confinamento de 1 elétron em sistemas parabólicos retos.

Figura 18 – Gráficos comparativos entre as energias computacional e teórica intrínseca em parábolas retas.



(a) LCM com 30 centros.

(b) LCP com 30 centros.

Figura 19 – Regiões do confinamento eletrônico em sistemas lineares com curvas.

De acordo com as abordagens que desejamos comparar, esse modelo não enquadrou-se em nenhuma, uma vez que através da perspectiva extrínseca apresentada por (DA COSTA, 1981) as cargas deveriam estar distribuídas igualmente entre as regiões de maior curvatura. Enquanto que no tratamento intrínseco o elétron se localizaria na metade das curvas independente da geometria adotada.

A partir de 21 centros (correspondente a um comprimento de 30,8 Å) as energias computacionais se mantiveram próximas de 0,98 eV, embora tenham oscilado em escalas de meV (Fig. 21a). Os espectros intrínseco teórico decresceram de 0,101 eV nos modelos de menor proporção à faixas de meV nas estruturas acima de 30 Å (Fig. 21b). Então, com o aumento dos comprimentos das nanoestruturas o comportamento energético observado seria ainda mais destacado.

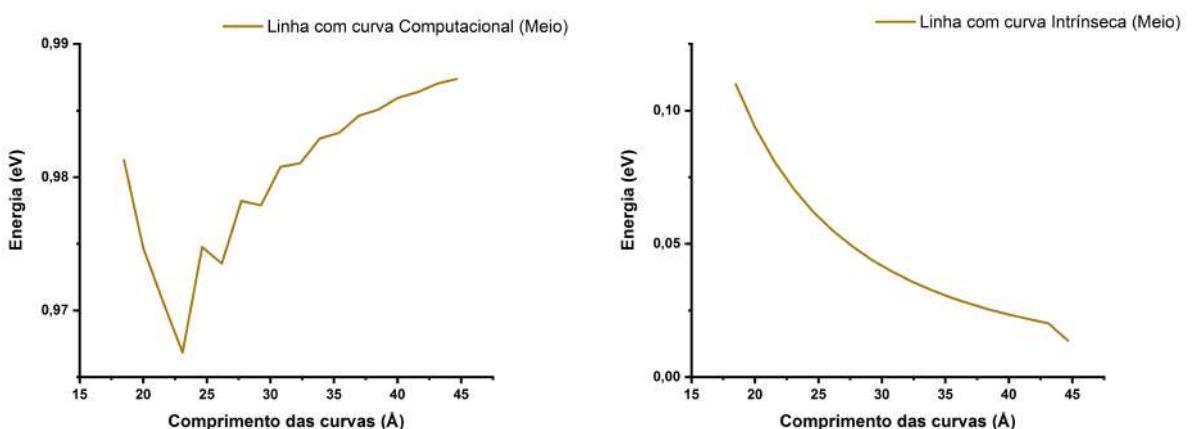
Nos modelos lineares com curvas em que os centros foram adicionados nas pontas, o elétron se comportou similarmente aos modelos com geometria em T. No qual as pontas atuaram como indutoras de um poço de potencial na região central



(a) Região LCM com 20 centros.

(b) Região LCM com 30 centros.

Figura 20 – Distribuições de cargas em sistemas lineares com curvas no meio no confinamento de 1 elétron.



(a) Energias computacionais em sistemas lineares com curvas meio no confinamento de 1 elétron.

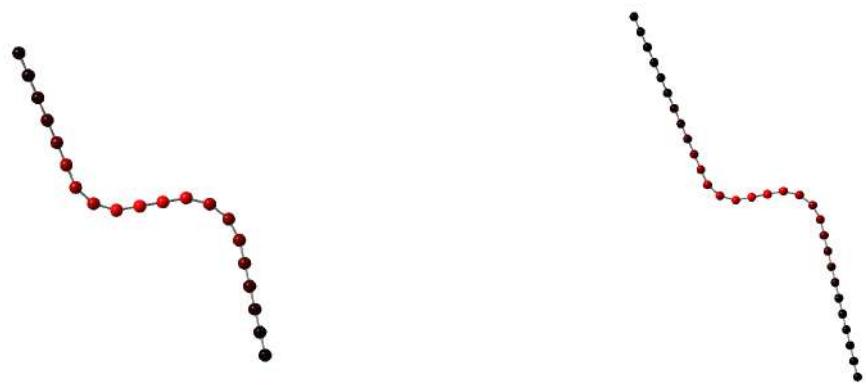
(b) Energias teórica intrínseca em sistemas lineares com curvas meio no confinamento de 1 elétron.

Figura 21 – Gráficos comparativos entre as energias computacional e teórica intrínseca em sistemas lineares com curvas meio.

dessas estruturas (Fig. 22). As distribuições de carga permaneceram na mesma região (considerando os 5 átomos centrais que se referem ao tamanho de $6,16\text{\AA}$) independentemente dos comprimentos das nanoestruturas. Portanto, nesses sistemas o tamanho das estruturas não foi fator determinante da concentração eletrônica.

Os sistemas estudados acima adequaram-se aos tratamentos intrínseco e ex-trínseco, visto que o elétron se encontrou na região central das geometrias como indica o primeiro modelo de confinamento e também na localidade de maior curvatura devido ao potencial gerado pelas pontas das estruturas, concordando com a modelagem ex-trínseca.

Os espectros computacionais nestes sistemas assim como nos anteriores se encontraram em torno de 0,940eV variando em escalas de meV (Fig. 23a) conforme



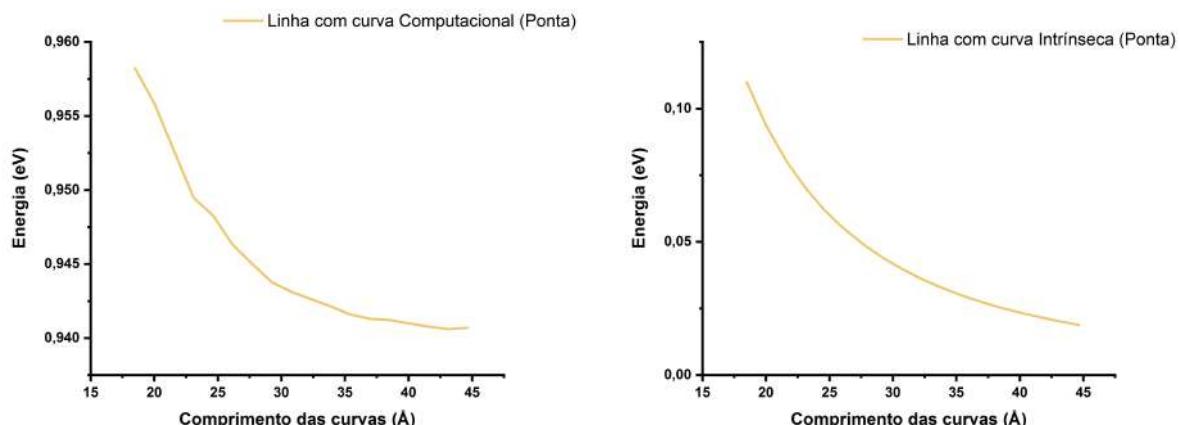
(a) LCP com 20 centros.

(b) LCP com 30 centros.

Figura 22 – Distribuições de carga em sistemas lineares com curvas ponta.

os centros das moléculas aumentava mas permanecendo em toda a série calculada na faixa de 0,9eV. Por outro lado, as energias intrínsecas teórica caíram ligeiramente de 0,101eV à região de 0,019eV com o aumento dos comprimentos das estruturas (Fig. 23b).

Considerando apenas a região de maior intensidade (equivalente a 6,16 \AA), as energias computacional e intrínseca teórica corresponderiam a 0,94eV e aproximadamente 0,98eV, respectivamente.



(a) Energias computacionais nos sistemas lineares com curvas ponta. (b) Energias intrínsecas teórica nos sistemas lineares com curvas ponta.

Figura 23 – Gráficos comparativos entre as energias computacional e teórica intrínseca em sistemas lineares com curvas ponta.

5.2 Confinamento de 2 elétrons

Nesta seção foi abordado o confinamento eletrônico para 2 elétrons não interagentes, com a finalidade de estudar o comportamento eletrônico e as energias computacionais nos mesmos sistemas vistos na seção 5.1. Neste modelo de confinamento os resultados se mostraram análogos em todas as estruturas estudadas.

5.2.1 Lineares

Analisamos o confinamento eletrônico de 2 elétrons para os mesmos sistemas utilizados na seção 5.1.

Nos modelos lineares as distribuições de carga dos elétrons se localizaram nos centros em cada extremidade da geometria, desde as estruturas de menor comprimento até as maiores. O comportamento eletrônico observado foi identico para todas as moléculas (Fig. 24).

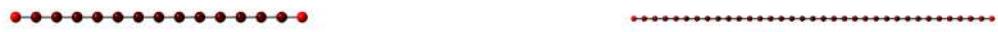


Figura 24 – Distribuições de carga no confinamento de 2 elétrons em sistemas lineares.

As energias computacionais variaram de 6,88eV a 3,10eV a medida que os tamanhos das moléculas aumentavam, de forma que as estruturas menores foram mais energéticas do que as maiores. Embora a queda energética tenha ocorrido rapidamente, a partir de 60Å as energias variaram na faixa em torno de 0,1ev, e nessa escala é possível encontrar a formação de ligações químicas (Fig 25).

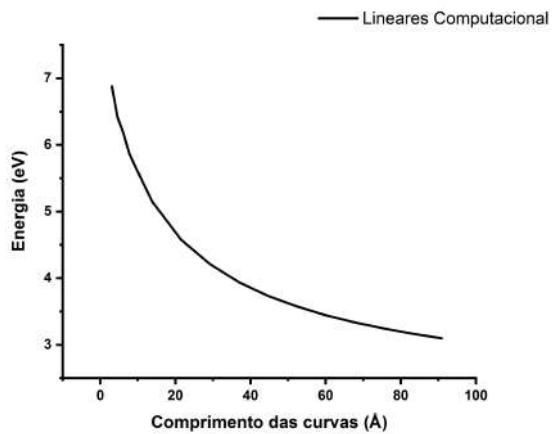
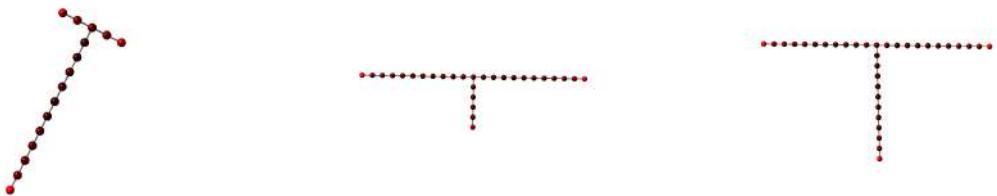


Figura 25 – Gráfico das energias computacionais nos sistemas lineares para o confinamento de 2 elétrons.

Para os sistemas lineares com retas conectadas as distribuições de carga foram similares em todos os modelos (assim como no confinamento para 1 elétron), mas neste modelo de confinamento os elétrons foram localizados nos átomos das extremidades de cada reta (Fig. 26). Portanto, estes modelos se comportaram analogamente a geometria anterior, visto que os elétrons se localizaram na região de maior distância possível entre eles.



(a) THF com 16 centros . (b) TVF com 28 centros. (c) TS com 34 centros.

Figura 26 – Distribuições de carga em sistemas lineares com retas conectadas para o confinamento de 2 elétrons.

As energias computacionais nos sistemas TS e nos TVF assim como nas geometrias anteriores apresentaram variações gradativas em escalas de 1eV nas estruturas menores, no entanto a partir de 40Å as energias oscilaram na faixa de 0,1eV nas quais mantiveram-se próximas de 3,75eV. Nos modelos THF os espectros exibiram o mesmo comportamento gráfico das geometrias em TS e TVF, porém mantendo as energias na região de 4eV a partir dos comprimentos entre 20Å à 35Å (Fig. 27).

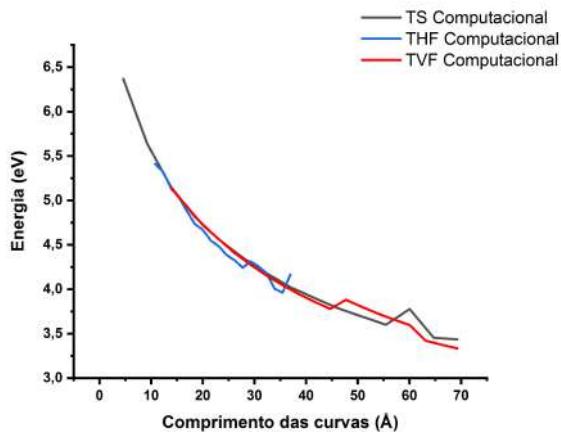


Figura 27 – Gráfico das energias computacionais nos sistemas lineares com geometria T para o confinamento de 2 elétrons.

5.2.2 Circulares

Nos modelos circulares as densidades eletrônicas foram uniformes em todos os centros das curvas, assim como no confinamento de 1 elétron. Podemos afirmar que os elétrons poderiam estar dispostos igualmente por toda a região confinante independente dos comprimentos empregados as circunferências (Fig. 29).

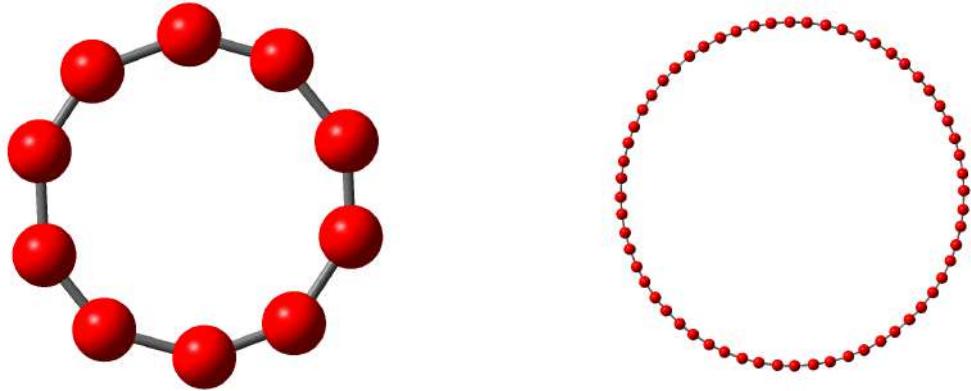


Figura 28 – Distribuição de carga em sistemas circulares no confinamento de 2 elétrons.

Assim como nos modelos anteriores os espectros computacionais nesta geometria variaram ligeiramente na região entre 6,0eV à 3,4eV descrevendo o gráfico de uma função do primeiro grau.

5.2.3 Similares aos Parabólicos

Nos sistemas parabólicos suaves os elétrons se localizaram na região de maior distância possível entre eles (Fig. 30a). Por outro lado, nas parábolas retas as cargas

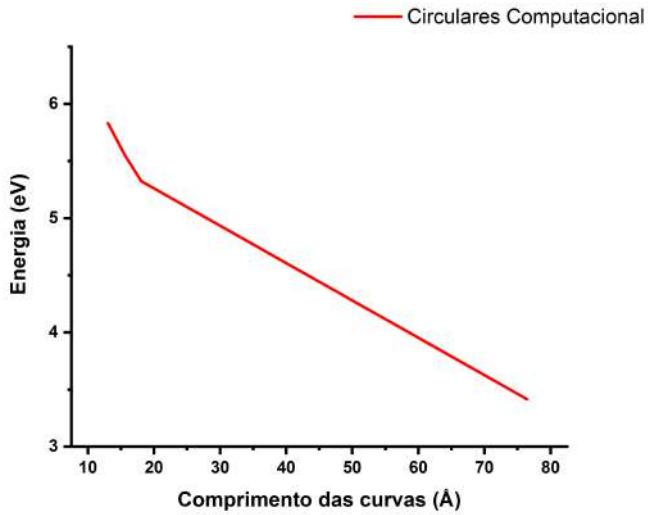


Figura 29 – Gráfico das energias computacionais nos sistemas circulares para o confinamento de 2 elétrons.

dos elétrons se concentraram à $6,74\text{\AA}$ uma da outra (Fig. 30b), mesmo com o aumento nos comprimentos da geometria.



(a) Parábola suave com 16 centros.

(b) Parábola reta com 15 centros.

Figura 30 – Distribuições de carga em sistemas similares aos parábólicos no confinamento de 2 elétrons.

As energias computacionais em ambas as geometrias apresentaram queda conforme os centros foram sendo adicionados aos modelos. Nas parábolas suaves a diminuição nos espectros esteve entre 6,43eV à 3,66eV, e a partir de 40Å as energias situaram-se no entorno de 3,5eV. No caso das parábolas retas foi visto que os espectros localizaram-se próximos de 6,89eV à 3,18eV de forma análoga as parábolas suaves, o comportamento gráfico exibido em ambos os modelos foram correlatos e equivalentes à função exponencial (Fig.31).

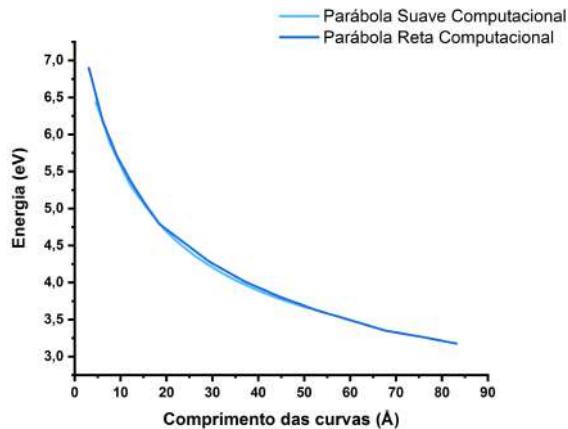
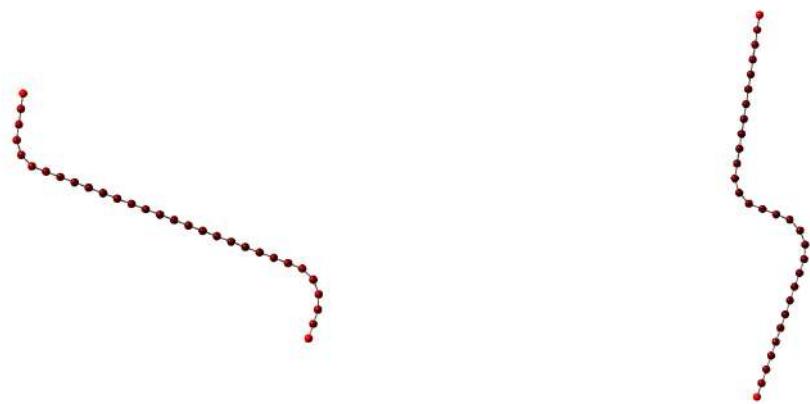


Figura 31 – Gráfico das energias computacionais nos sistemas similares aos parabólicos no confinamento de 2 elétrons.

5.2.4 Lineares com curvas

Análogas aos sistemas já descritos anteriormente, as distribuições de carga das linhas com curvas, os elétrons se encontraram nas regiões extremas das estruturas desses modelos. Nas LCM as densidades eletrônicas variaram moderadamente, de modo que parte delas foram conduzidas para a região de maior curvatura. E apesar disso, os centros das extremidades ainda apresentaram a maior concentração de carga (Fig. 32a).



(a) LCM com 30 centros.

(b) LCP com 30 centros.

Figura 32 – Distribuições de carga em sistemas lineares com curvas no confinamento de 2 elétrons.

Os sistemas de LCP também exibiram densidades eletrônicas na região de maior distância entre os elétrons, semelhante ao comportamento descrito pelos sistemas anteriores. As distribuições de carga se concentraram nos centros situados nas extremidades dos sistemas (Fig. 32b).

Os espectros computacionais nos dois sistemas lineares com curvas apresen-

taram comportamentos gráficos praticamente equivalentes, descrevendo uma função linear. As energias variaram nos modelos LCM em torno de 4,73 Å à 3,69 Å a medida que as curvas ampliavam, enquanto que para os sistemas LCP os espectros oscilaram entre 4,69 Å à 3,72 Å. Então, as variações energéticas apresentadas nestes sistemas foram entre escalas de 0,1 eV e 0,01 eV sendo uma das exceções se comparadas com as faixas espectrais das geometrias anteriores para o confinamento de 2 elétrons (Fig. 33).

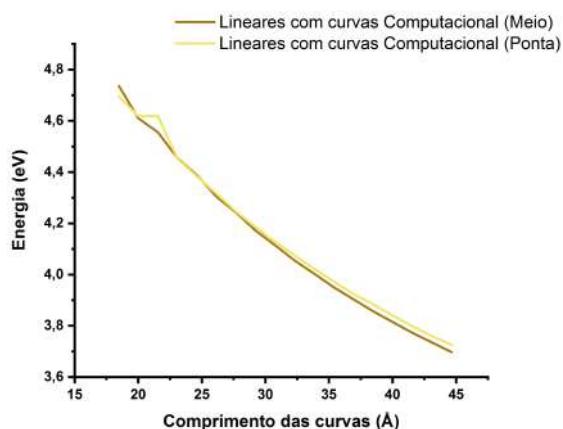


Figura 33 – Gráfico das energias computacionais em sistemas lineares com curvas no confinamento de 2 elétrons.

As distribuições de cargas previstas pelas modelagens de Da Costa e pela intrínseca não puderam ser confirmadas através no confinamento de 2 elétrons em átomos fantasma, uma vez que em todas as geometrias os elétrons buscaram permanecer o mais distante possível uns dos outros, com exceção apenas dos sistemas circulares e dos parabólicos retos.

Portanto, o confinamento eletrônico de 2 partículas demonstraram que o comportamento gráfico para todos os sistemas foi análogo, com ressalvas apenas para os sistemas circulares que apresentaram linearidade tanto no confinamento de 1 elétron quanto no de 2 elétrons. Novak (NOVAK, 2001) demonstrou que os fermions (neste trabalho em particular usamos os elétrons) se afastam uns dos outros em consequência de limitações impostas nas funções de onda das partículas, além da repulsão Coulombica também ter contribuído com a repulsão eletrônica nestes sistemas.

6 Considerações Finais

Analisamos uma série de curvas correspondentes a nanoestruturas no confinamento eletrônico. Estudamos o comportamento eletrônico através das distribuições de cargas e suas energias relacionadas. Foram verificados padrões em alguns dos sistemas simulados computacionalmente em acordo com o modelo intrínseco analítico e também com o previsto por Da Costa, especialmente nas distribuições de carga dos elétrons nas nanoestruturas.

As distribuições de carga no confinamento de 1 elétron se localizaram na região central das estruturas lineares, parabólicas suaves e lineares com curvas na ponta. Em todos esses sistemas o comportamento previsto pelo modelo analítico intrínseco foi confirmado. Nos sistemas parabólicos suaves e lineares com curvas na ponta também foi verificado o comportamento descrito pela modelagem extrínseca. Nos modelos lineares com curvas no meio as distribuições de carga divergiram em ambas abordagens, neste caso o elétron se concentrou somente em uma das curvas.

No caso do confinamento de 2 elétrons, as distribuições de carga em todos os sistemas foram análogas: concentraram-se nas regiões de maior distância entre as partículas. Seria possível afirmar então que esse efeito foi resultante da repulsão eletrônica existente em sistemas multieletrônicos, além de estar atrelado à limites exigidos através das funções de onda na equação de Schrödinger. Os modelos circulares e parabólicos retos foram as exceções desse padrão comportamental, indicaram que as cargas poderiam se concentrar em todos os centros nas curvas dos modelos circulares e numa distância de 6,74 Å entre os elétrons nos sistemas parabólicos retos. Nesses casos a abordagem prevista por Da Costa não se aplicou a nenhum desses sistemas e a modelagem intrínseca descreve apenas os sistemas circulares.

As energias computacionais no confinamento de 1 elétron foram próximas de 1 eV com oscilações em escalas de 0,1 eV para os sistemas lineares e parabólicos, enquanto que para os demais modelos a variação esteve na proporção de 0,01 eV. E embora aparente ser uma pequena variação, a escala de 0,1 eV pode indicar fenômenos típicos de ligações químicas. Por outro lado, no caso do confinamento de 2 elétrons, as energias calculadas em todos os sistemas foram reduzindo gradativamente conforme o comprimento das estruturas aumentava. Os valores foram entre 6,0 eV a 3,5 eV. Apesar dos modelos estudados serem simples é possível encontrar potenciais aplicações práticas: o uso de nanoestruturas 1D como meio de otimização do transporte eletrônico além do envelopamento de fotocatalizadores.

Referências

- BALLHAUSEN, H. B. G. C. J. *Molecular Orbital Theory*. New York, United States: W. A. Benjamin, INC, 1965. Citado na página 16.
- BARANWAL, A. et al. Prospects of nanostructure materials and their composites as antimicrobial agents. *Frontiers in Microbiology*, 03 2018. Citado na página 13.
- BASTOS, C. C.; PAVÃO, A.; LEANDRO, E. On the quantum mechanics of a particle constrained to generalized cylinders with application to möbius strips. *Journal of Mathematical Chemistry*, v. 54, p. 1822–1834, 06 2016. Citado na página 22.
- CARMO, M. P. D. *Differential Geometry of Curves and Surfaces*. 2^a. ed. United States: Dover Publications, 2016. Citado na página 14.
- CARVALHO, M. R.; REIS, R.; OLIVEIRA, J. Dendrimer nanoparticles for colorectal cancer applications. *Journal of Materials Chemistry B*, 01 2020. Citado na página 13.
- DA COSTA, R. C. T. Quantum mechanics of a constrained particle. *Physical Review A*, v. 23, p. 1982–1987, 04 1981. Citado 4 vezes nas páginas 13, 23, 28 e 30.
- DA SILVA, L. C.; BASTOS, C. C.; RIBEIRO, F. G. Quantum mechanics of a constrained particle and the problem of prescribed geometry-induced potential. *Annals of Physics*, v. 379, p. 13–33, 2017. Citado 3 vezes nas páginas 13, 15 e 21.
- EKONG, S. A.; OSIELE, M. O. A quantum confinement study of the electronic energy of some nanocrystalline silicon quantum-dots. *International Letters of Chemistry, Physics and Astronomy*, v. 63, p. 106–110, 2016. Citado na página 13.
- FRISCH, M. J. et al. *Gaussian~09 Revision C.01*. 2009. Gaussian Inc. Wallingford CT. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 22.
- GRIFFITHS, D. J. *Introduction to Quantum Mechanics*. 3^a. ed. United States: Cambridge University Press, 2018. Citado na página 15.
- KHAKPOOR, A. A. Total electron energy of linear acenes nanostructure. *International Letters of Chemistry, Physics and Astronomy*, v. 64, p. 110–115, 02 2016. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 22.
- LEVINE, I. N. *Quantum Chemistry*. United States: Prentice Hall, 2000. Citado na página 16.
- NOVAK, I. Two particle in a box. *Journal of Chemical Education*, v. 78, p. 395–397, 03 2001. Citado na página 38.
- ROOTHAAN, C. C. J. New developments in molecular orbital theory. *Reviews of Modern Physics*, v. 23, p. 69–89, 1951. Citado na página 18.
- SANTOS, F. et al. Geometric effects in the electronic transport of deformed nanotubes. *Nanotechnology*, v. 27, 2016. Citado na página 22.

SCHRODINGER, E. Quantisierung als eigenwertproblem. *Annalen Der Physik*, v. 384, p. 361–376, 1926. Citado na página [15](#).

XIA, Y. et al. One-dimensional nanostructures: Synthesis, characterization, and applications. *Advenced Materials*, v. 15, 03 2003. Citado na página [13](#).