



II EVENTO INTEGRADO – PROCIEMA Educação, Ciências e Extensão: Transformando Vidas

Estudando a interação entre Pósitron e átomos: formação de novos complexos

Adriane Martins Alves¹, Maria Aparecida Silva Silveira², Cristina Porto Gonçalves³

RESUMO

O elétron possui uma antipartícula chamada pósitron (e^+), que possui composto instável denominado de positrônio ou Ps (pósitron e elétron). Esse, permite a formação de complexos moleculares mediante as ressonâncias vibracionais de Feshbach. Então o interesse no estudo dessa partícula e da formação desses complexos ganhou atenção da comunidade científica para entender a interação da matéria e da antimatéria, e por suas várias aplicações: A Tomografia por Emissão de Pósitrons (PET), a investigação de semicondutores e defeitos em eletrônicos, identificação espectrométrica, distribuição na Via Láctea, experimentos sobre o efeito da gravidade. Neste trabalho, com a finalidade de entender melhor os complexos, estudou-se a interação do pósitron com o Hidrogênio e seus isótopos e com os átomos Halogênios. De acordo com a metodologia aplicada, o pósitron é tratado como um núcleo leve e o seu movimento pode ser completamente separado, de forma adiabática, do movimento dos demais elétrons do sistema. Além disso, utilizou-se a Correção de Massa Nuclear Finita (FNMC) [Finite Nuclear Mass Correction; Gonçalves] para complementar à Aproximação Born-Oppenheimer, que torna possível o estudo do Pósitron. Para o desenvolvimento desta pesquisa, foi utilizado a ferramenta de simulação computacional GAMESS (*General Atomic and Molecular Electronic Structure System*), a implementação da correção no referido programa e da linguagem Phyton para análise dos resultados (com criação de gráficos e animações). Observou-se as energias de ligação dos complexos formados, esses que bateram com nossas previsões da literatura, fator que indicou bom direcionamento da pesquisa. Além disso constatamos mudanças nas frequências dos modos normais que mudaram com a presença da anti-matéria e mudanças nas geometrias de equilíbrio das moléculas com sua presença. Esses resultados mostram como a presença do pósitron altera as características das moléculas e para entender melhor suas consequências e sua validade eles foram confrontados com os da literatura.

Palavras-chave: Interação. Hidrogênio. Halogênios. GAMESS.

Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, Departamento de Ciências Exatas e Tecnológicas, Vitória da Conquista, Bahia, Brasil¹. E-mail: 201911860@uesb.edu.br

Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, Departamento de Ciências Exatas e Tecnológicas, Vitória da Conquista, Bahia, Brasil². E-mail: 201912326@uesb.edu.br

Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, Departamento de Ciências Exatas e Tecnológicas, Vitória da Conquista, Bahia, Brasil³. E-mail: cgoncalves@uesb.edu.br