

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

### A partícula $e^+$ formando novos complexos: Interação do pósitron com átomos

Adriane Martins Alves<sup>1</sup>, Maria Aparecida Silva Silveira<sup>2</sup>, Cristina Porto Gonçalves<sup>3</sup>

#### RESUMO

O elétron possui uma antipartícula chamada de pósitron ( $e^+$ ), que possui um composto instável chamado de positrônio ou Ps (pósitron e elétron). Esse composto possibilita a formação de complexos com átomos e moléculas. O interesse no estudo dessa partícula, e na formação desses complexos, ganhou atenção da comunidade científica a interação de matéria e anti-matéria, e suas várias aplicações como a Tomografia por Emissão de Pósitrons (PET) utilizada em diagnósticos de câncer. Neste trabalho, afim de entender melhor os complexos, estudamos a interação do pósitron com o Hidrogênio e seus isótopos e com os átomos Halogênios. Em nossa metodologia 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, utilizamos a Correção de Massa Nuclear Finita (*Finite Nuclear Mass Correction* - FNMC) que pode ser entendida como complementar à Aproximação Born-Oppenheimer, e que torna possível o estudo do Pósitron. Para o desenvolvimento desta pesquisa, é 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 totais e de ligação dos complexos formados, esses que se influenciaram pela eletronegatividade de cada um dos átomos, resultado esse que concordava com nossas previsões da literatura, fator que indicou bom direcionamento do nosso método. Além disso constatamos mudanças nas frequências dos modos normais (vibração dos átomos) quando na presença da anti-matéria e mudanças na geometria de equilíbrio das moléculas com sua presença. Esses resultados mostram como a presença do pósitron altera as características dos átomos e complexos e para

Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, Departamento de Ciências Exatas e Tecnológicas, Vitória da Conquista, Bahia, Brasil<sup>1</sup>. E-mail: 201911860@uesb.edu.br

Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, Departamento de Ciências Exatas e Tecnológicas, Vitória da Conquista, Bahia, Brasil<sup>2</sup>. E-mail: mariasilveirafisic@gmail.com

Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, Departamento de Ciências Exatas e Tecnológicas, Vitória da Conquista, Bahia, Brasil<sup>3</sup>. E-mail: cgoncalves@uesb.edu.br

entender melhor suas consequências e sua validade eles foram confrontados com a literatura.

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

## 1. INTRODUÇÃO

O pósitron ( $e^+$ ) é a anti-partícula do elétron ( $e^-$ ), isso por que ele possui as mesmas propriedades de um elétron, porém com uma carga positiva. O estudo do Pósitron data de 1928, pois foi previsto por Paul A. M. Dirac, em sua teoria de buracos, porém só veio a ser detectado em 1932 por Carl David Anderson com fotografias de trajetórias de raios cósmicos na presença de um campo magnético como visto na Figura 1, resultado experimental este que rendeu a ele o Nobel de 1936.

Este componente possui um composto instável formado por um pósitron e um elétron, chamado de positrônio ou Ps, que tem sua estrutura como visto na Figura 2 (Ruark, 1945), e apesar de entendermos que cargas opostas tendem a se aniquilar, nem sempre um pósitron se aniquila instantaneamente quando de encontro ao elétron, isso por que alguns ângulos ou diferenças de trajetória formam um complexo conhecido também como anti-hidrogênio. Outra maneira de formá-lo é pelas chamadas ressonâncias de Feshbach que conhecemos como moléculas virtuais (Capucho, 2013). É o positrônio que possibilita a formação de complexos moleculares com outros átomos e moléculas, antes que o pósitron sofra aniquilação por pares com um elétron, tornando assim nosso estudo teórico possível.

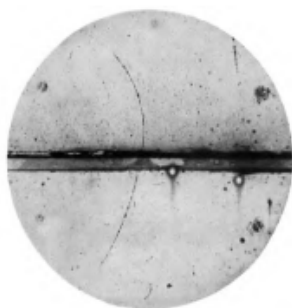


Figura 1: Trajetórias de raios cósmicos.

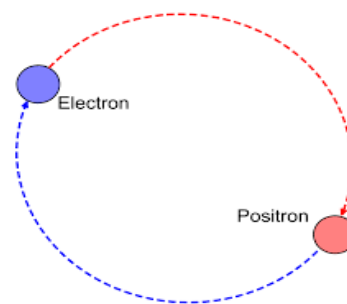


Figura 2: O Positrônio.

O interesse no estudo do Pósitron vem ganhando a atenção da comunidade científica pela necessidade de se entender a dinâmica de interação de matéria e anti-matéria, além de possuir várias aplicações práticas e de estudos teóricos, como a Tomografia por Emissão de Pósitrons (PET) para propósitos de diagnóstico de câncer sem risco ao paciente, investigação de semicondutores e defeitos em eletrônicos, identificação da espectrometria de moléculas biológicas (Jean et al, 2003), descobertas na distribuição de pósitron na nossa galáxia (Weidenspointner et al, 2008), experimentos sobre o efeito da

gravidade sobre o anti-hidrogênio; entre outras aplicações que evidenciam a importância de seu estudo. Apesar do extenso uso e aplicações, fato esse que só foi possível devido ao desenvolvimento de tecnologias envolvendo o  $e^+$ , o pósitron ainda se mostra como uma partícula muito curiosa no seu campo de pesquisa. Ainda existem muitas perguntas não respondidas, e que ao serem respondidas podem trazer grandes inovações tecnológicas. Existe também, a necessidade de construção de banco de dados teóricos de seu comportamento com todo tipo de átomo e molécula, para que a Física experimental possa estudar seu comportamento de forma mais eficiente, fato esse que nos impulsionou a realizar esse estudo.

Neste trabalho temos como objetivo estudar a interação do pósitron com átomos, focando nas alterações do antes e depois da presença do  $e^+$ . De forma mais específica, observamos a interação com o Hidrogênio e seus isótopos (átomos de interesse no estudo do Pósitron por já terem resultados experimentais confiáveis e que mostram grande energia de ligação entre eles) e com átomos Halogênios (escolhidos por sua grande eletronegatividade, fato que torna a ligação entre eles mais forte). Focaremos nossas análises nas energias de ligação das novas moléculas formadas com os complexos, as energias de dissociação, seus modos normais e a relaxações de sua geometria, a fim de observar as consequências da interação matéria e anti-matéria.

## 2. MATERIAIS E MÉTODOS

Essa pesquisa, estabelecida na área de Física Atômica e Molecular, e com foco em simulação computacional, foi dividida em várias etapas que podem ser resumidas em 3 momentos. Primeiro foi estudado os conceitos teóricos necessários importados da Mecânica Quântica, posteriormente realizamos as simulações necessárias (das mais simples para as mais complexas) e por fim desenvolvemos formas de analisar esses resultados. De forma paralela a essas etapas analisamos constantemente os resultados e comparamos com os conceitos e dados da literatura, a fim de melhorar nossos métodos e estratégias no desenvolvimento dos nossos códigos computacionais.

Para a realização da pesquisa, o projeto teve como principal ferramenta o software de simulação GAMESS (*General Atomic and Molecular Electronic Structure System*) uma ferramenta computacional capaz de simular a interação entre sistemas moleculares e que tem a capacidade de nos fornecer uma série de informações sobre elas. Com essa ferramenta, fomos capazes de desenvolver nossa pesquisa, com as condições que possuímos no momento.

Para realizar cálculos no comportamento dos átomos é necessário resolver a equação de Schroedinger como segue:

$$\hat{H} \Psi = E \Psi \quad (1)$$

nela  $\hat{H}$  é um operador diferencial, chamado operador Hamiltoniano, o qual depende do sistema estudado e fornece a energia total  $E$ ;  $\Psi$  representa a função de onda do sistema molecular estudado que depende das coordenadas espaciais dos núcleos atômicos e dos

elétrons. Porém, essa equação não possui solução analítica quando se trata de sistemas mais complexos que o Hidrogênio, por conta da complexidade do seu Hamiltoniano ( $\hat{H}$ ), por isso se vê necessário a utilização de aproximações para melhor defini-lo.

Em nosso trabalho, utilizamos 2 formas de aproximação para descrever o movimento dos entes da interação, a conhecida Aproximação Born-Oppenheimer (B.O), que tem seu Hamiltoniano como visto na Equação 2, essa aproximação também já existente na biblioteca do nosso software de simulação, que separa o movimento dos elétrons do movimento dos núcleos, justificado pela grande diferença de massa entre eles. E de uma nova metodologia desenvolvida por Mohallem (2004) e colaboradores denominada de FNMC (*Finite Nuclear Mass Correction*) ou Correção de Massa Nuclear Finita, que tem seu Hamiltoniano como visto na Equação 3, que pode ser entendida como complementar à Aproximação Born-Oppenheimer, e é ela que torna possível o estudo de diferentes propriedades dos pósitrons.

$$H_{el} = H_{BO}^{(0)} = - \sum_i \frac{1}{2m_e} (\nabla_i)^2 + V$$

Equação 2: Hamiltoniano da B.O

$$H_{mol} = \sum_A^m \left( - \sum_i^n \frac{(\nabla_i)^2}{2M_A} \delta_{AB} \right) - \sum_i^n \frac{1}{2m_e} (\nabla_i)^2 + V$$

Equação 3: Hamiltoniano da FNMC

Para a utilização dessa nova correção, o pacote GAMESS foi alterado para incluir a FNMC, fato que só foi possível pois o software tem um código aberto, que torna ele preferível em nossa pesquisa (este novo programa é chamado de ISOTOPE). Ambas as aproximações foram utilizadas em todas as etapas de simulação, afim de comparar os resultados e comprovar a eficiência da correção.

Apesar dos métodos de aproximação serem eficientes na simplificação dos cálculos da equação de Schroedinger para o movimento dos núcleos e elétrons, ainda existe uma questão nos cálculos da repulsão eletrostática elétron-elétron. A complexidade desses cálculos exige uma outra fonte de aproximação. A partir da biblioteca computacional do simulador testamos diversos métodos para melhorar nossos resultados nesse sentido, e para nosso trabalho, escolhemos utilizar 2 métodos principais, o conhecido como método Hartree-Forck, e o método MP2 (*second order Møller-Plesset perturbation theory*).

Almeida e Santos (2001) descrevem o método Hartree-Forck como o procedimento onde se parte de uma função de onda tentativa (normalmente da solução do Hidrogênio) que é aplicado na equação de Schroedinger repetidas vezes até se obter o que ele chama de auto consistência (não haja mais variações na função de onda). Esse método trata os elétrons como se seus movimentos fossem independentes e resolve para cada um uma equação fundamental associada, tendo como solução uma somatória das influências das energias potenciais que se torna o chamado de potencial médio de todos os elétrons

envolvidos. Já o método MP2, de acordo com Kragh (2022), usa a teoria Hartree-Fock como ponto de partida, mas adiciona uma pequena perturbação de segunda ordem aos cálculos, que corresponde a interação elétron-elétron negligenciada pela teoria anterior. Dessa forma comparamos os resultados da utilização dos dois métodos para determinar quais alcançam valores mais próximos dos conseguidos experimentalmente. Também utilizamos de várias bases de função (usadas para descrever a função de onda dos átomos escolhidos): "10s 6p", "aug- cc-PVTZ" e "aug- cc-PVQZ" entre outras específicas para cada momento da pesquisa.

Além dos dados obtidos através do simulador, utilizamos da linguagem Python para aprimorar a análise dos resultados obtidos pelo software através de animações, gráficos e análise de dados. Todos esses recursos computacionais foram instalados nas máquinas do Laboratório de Física teórica da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia - UESB, sendo as pesquisas mantidas no âmbito teórico por conta dos recursos disponíveis.

### 3. RESULTADOS ESPERADOS E DISCUSSÕES

O principal resultado que esperamos obter é o de entender melhor como o Póstron interage com a matéria e como surge os complexos. Faremos isso, como já dito anteriormente, identificando quais as consequências da aproximação desse composto nos sistemas, focando nossa atenção em quais mudanças essa partícula produz. Com esse resultado também entendemos como os átomos e moléculas que escolhemos se influenciam nessas situações produzindo assim banco de dados sobre eles.

Para analisar nossos resultados nos baseando nas literaturas estudadas de Mohallem e Gonçalves (2004); Tachikawa, Buenker e Kimura (2004); Assafrão e Mohallem (2007); Capucho (2013) e Romero, Carry, Moreno, Varella e Reys (2014). Como resultados iniciais observamos uma grande concordância das energias totais encontradas em nossa pesquisa com as presentes na literaturas, o que nos indicou confiabilidade no método. Um fator de grande interesse em nossa pesquisa foi ter identificado que, como esperávamos, a aproximação BO não foi capaz de identificar a presença do póstron nas simulações, isso por que a inexistência de termos da massa nuclear dos átomos faz a simulação interpretar a partícula como se fosse um próton ou um átomo de Hidrogênio, enquanto nosso método, utilizando da correção FNMC, foi capaz de identificar essa diferença.

Identificamos também uma maior afinidade do póstron com os átomos mais eletronegativos da coluna dos Halogênios, isso por que a partícula  $e^+$  teve a tendência de ficar cada vez mais próxima conforme a eletronegatividade aumentava, o que nos mostrou que essa característica influência nessa interação. Buscamos agora identificar grandes alterações nos modos normais (vibrações) dos átomos a partir de quanto mais o

pósitron se aproxima dos átomos. Também esperamos encontrar valores de energia de ligação e de dissociação para entender melhor a interação desses complexos.

Ademais, conforme o caminhar da pesquisa, pretendemos identificar que nosso software e códigos produzidos preenchem nossas necessidades como grupo de pesquisa e estabelecer quais métodos presentes nele nos trazem melhores resultados (como qual a melhor base de função, quais as melhores configurações iniciais para a simulação e quais métodos, que são acessíveis aos nossos processadores, são mais eficientes). Pretendemos também estabelecer as vantagens e desvantagens da correção FNMC.

Os resultados que obtivermos com nosso simulador posteriormente serão passados para a linguagem Phyton onde produziremos gráficos e animações, para termos uma visibilidade melhor dos processos de aproximação e de como esses complexos se comportam. Com essa análise pretendemos ver as mudanças nas geometrias de forma mais clara e em seus modos vibracionais a partir da aproximação da partícula com os diferentes métodos compostos em nosso simulador.

#### 4. CONCLUSÃO

Essa pesquisa tem como proposta fundamental proporcionar o entendimento sobre o comportamento de sistemas moleculares e suas interações e como elas podem ser calculadas usando a mecânica quântica. Além disso, alcançaremos o melhor entendimento do GAMESS (*General Atomic and Molecular Eletronic Structure*) e dos pacotes computacionais que funcionam no cálculo das interações da anti-matéria, possibilitando novas pesquisas mais complexas sobre o comportamento do Pósitron.

Mostraremos que o comportamento do pósitron, apesar de formar uma ligação com tempo de vida muito curto (2,008ns), é possível de ser estudada, fato que se mostra a partir do encontro da geometria de equilíbrio de forma teórica. Esse estudo só se torna possível para nosso grupo mediante a metodologia abordada, como a correção FNMC que permite a distinção isotópica (distinguir moléculas a nível eletrônico) dos isotopômeros do Hidrogênio.

#### 5. REFERÊNCIAS

ALMEIDA, Wagner Batista de; SANTOS, Hélio Ferreira; Modelos Teóricos para Compreensão da Estrutura da Matéria. **Cadernos temáticos de Química Nova na Escola**, n. 4, p. 6-13, maio. 2001. Disponível em: <http://qnesc.sbq.org.br/online/cadernos/04/mod-teor.pdf>. Acesso em: 09 ago. 2024.

ASSAFRÃO, Denise da Costa. **Aplicações do modelo molecular no estudo de complexos de pósitron: taxa de aniquilação, relaxação molecular e espalhamento.**

Orientador: Dr. José Rachid Mohallem. 2009. 130 f. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2009.

ASSAFRÃO, Denise da Costa; MOHALLEM, José Rachid; The isotopic dipole moment of HDO. **Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics**. n. 5, v. 40, p. 85-91, fev. 2007. Disponível em: <https://doi.org/10.1088/0953-4075/40/5/F02>. Acessado em 10 de agosto de 2024.

CAPUCHO, Ivan Meloti. **Espalhamento de Pósitron por Átomos e Moléculas: Aplicação ao Átomo de He e a Molécula de H<sub>2</sub>**. Orientadora: Dra. Denise da Costa Assafrão de Lima. 2013. 75 f. Monografia de Final de Curso (Bacharelado em Física) – Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2013.

GONÇALVES, Cristina Porto; ROLIM, Flávia; MOTA, Vinícius Cândido; MOHALLEM, José Rachid; Molecular dynamics simulations of isotope compounds of hydrogen atoms: prospects and progress. **Journal of Molecular Structure: Theochem**. n.4, v.580, p. 33-38, março. 2002. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0166-1280\(01\)00592-9](https://doi.org/10.1016/S0166-1280(01)00592-9). Acesso em 10 de agosto de 2024.

JEAN, Jerry YC; MALLON, Peter; SCHRADER, David Martin. **Principles and Applications of Positron and Positronium Chemistry**. Singapura, Editora: World Scientific 2003.

KRAGH, Helge. Chemists Without Knowing It? Computational Chemistry and the Møller-Plesset Perturbation Theory. **Substantia na International Journal of the History of Chemistry**, n.2, v. 6, p. 43–54, Set. 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.36253/Substantia-1564>. Acessado em 10 de agosto de 2024.

MOHALLEM, José Rachid; GONÇALVES, Cristina Porto. A note on geometry relaxation of molecular positron complexes. **The Journal of Chemical Physics**. n.11, v. 121, p. 5553, out. 2004. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.1781617>. Acessado em 10 de agosto de 2024.

MOHALLEM, José Rachid. Evidences of molecular structure beyond the Born-Oppenheimer approximation: the model hamiltonian. **Journal of Molecular Structure (THEOCHEM)**. v. 709, n.1-3, p. 11-13, nov. 2004. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.theochem.2003.12.055>. Acessado em 10 de agosto de 2024.

MolSSI - Molecular Sciences Software Institute; PNNL/EMSL - Pacific Northwest National Lab/Environmental Molecular Sciences Laboratory: Banco de dados. **Basis Set Exchange for Gamess-US**. Washington U.S. Disponível: <https://www.basissetexchange.org>. Acesso em: 10 de agosto de 2024.

MORGON, Nelson Henrique; COUTINHO, Kaline. **Métodos de química teórica e modelagem molecular**. Editora: Livraria da Física. São Paulo. 2007.

Python software foundation. **Python Language**. Wilmington, 2022. Disponível em: <https://www.python.org/>. Acesso em: 04 de junho. de 2024.

ROMERO, Jonathan; CHARRY, Jorge Alfonso; MORENO, Roberto Flores; VARELLA, Márcio Teixeira do Nascimento; REYES, Andrés. Calculation of positron binding energies using the generalized any particle propagator theory. **The Journal of Chemical Physics**. n.11 , v. 141 , p. 114103 , set. 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.4895043>. Acessado em 10 de agosto de 2024.

RUARK, Arthur Edward. Positronium. **American Physical Society**. n.11-12 , v. 68, p. 278, dez. 1945. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.68.278>. Acessado em 10 de agosto de 2024.

SCHMIDT, Micael W.; BALDRIDGE, Kim K.; BOATZ, Jerry A; ELBERT, Mark S.; GORDON, Jan H. Jensen.; KOSEKI, Shiro; MATSUNAGA, Nikita; NGUYEN Kiet A.; SU, Shujun; WINDUS, Theresa L.; DUPUIS, Michel; MONTGOMERY, John A. General Atomic and Molecular Electronic Structure System (GAMESS). **Journal of Computational Chemistry**. n.11, v. 14, p. 1347-1363, nov. 1993. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/jcc.540141112>. Acessado em 10 de agosto de 2024.

TACHIKAWA, Masanori; BUENKER, Robert J.; KIMURA, Mineo. Geometry relaxation effects for molecules as a result of binding with a positron. **The Journal of Chemical Physics**, n. 18, v. 121, p. 9191-9192, ago. 2004. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.1805493>. Acesso em 10 de agosto de 2024.

WEIDENSPONTNER, George; SKINNER, Gerry; JEAN, Pierre; KNODLSEDER Jurgen; BALLMOOS, Peter von; BIGNAMI, Giovanni; DIEHL, Roland; STRONG, Andrew W.; CORDIER, Bertrand; SCHANNE, Stéphane; WINKLE, Christoph. An asymmetric distribution of positrons in the Galactic disk revealed by  $\gamma$ -rays. **Nature**. n.10 ,v.451, p. 159–162, jan. 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.1038/nature06490>. Acesso em: 10 de agosto de 2024.