

II EVENTO INTEGRADO – PROCIEMA

Educação, Ciências e Extensão: Transformando Vidas

ESTUDO DE MOLÉCULAS DIATÔMICAS EXÓTICAS: ISÓTOPOS MUÔNICOS IONIZADOS

Maria Aparecida Silva Silveira¹, Adriane Martins Alves², Cristina Porto Gonçalves³

RESUMO

Os múons são partículas muito semelhante aos elétrons, mas são 200 vezes mais massivos. Eles parecem em dois tipos (μ^+ e μ^-) partícula e antipartícula. Esta pesquisa tem por objetivo estudar a geometria de equilíbrio e a energia eletrônica de sistemas moleculares contendo o antimúon em seu núcleo, tais como: μ_2^+ , $H\mu^+$, $D\mu^+$ e $T\mu^+$ comparando suas propriedades eletrônicas com os isotopômeros ionizados do hidrogênio, H_2^+ , D_2^+ e T_2^+ . Para o desenvolvimento da pesquisa, utiliza-se a renomeada *Finite Nuclear Mass Correction* (FNMC) (Gonçalves, 2004), complementar à Aproximação Born-Oppenheimer, onde a massa dos núcleos é mantida nos cálculos eletrônicos e todos os efeitos decorrentes da massa nuclear finita são implementados na solução da Hamiltoniana eletrônica, sendo possível o estudo de diferentes propriedades em isotopômeros. Realizou-se simulações computacionais por meio do software GAMESS (*General Atomic and Molecular Electronic Structure System*) e o programa Fortran 90 para determinar as energias e a geometria de equilíbrio localizada. Usou-se também, a produção de animações em Python para a simulação em 3D. Portanto, usar a metodologia FNMC foi de suma importância, pois com a aproximação Born-Oppenheimer (BO) não é possível verificar a distinção isotópica dos sistemas moleculares a nível eletrônico.

Palavras-chave: Antimúon. Isótopos. Múon. Moléculas.

Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, Departamento de Ciências Exatas e Tecnológicas, Vitória da Conquista, Bahia, Brasil.¹ E-mail: mariasilveirafisic@gmail.com

Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, Departamento de Ciências Exatas e Tecnológicas, Vitória da Conquista, Bahia, Brasil.² E-mail: 201911860@uesb.edu.br

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

INTRODUÇÃO

Nas pesquisas de píons, os físicos encontraram uma partícula com massa $1/9$ da massa do próton (Ostermann, 2001). Os múons aparecem em dois tipos (μ^+ e μ^-) e são 200 vezes mais massivos que o elétron e pósitron. Os átomos muônicos (μ^-), possuem propriedades físico-químicas semelhantes aos dos átomos de hidrogênio, no entanto, sua estrutura atômica é diferente, pois o múon apresenta-se mais próximo do núcleo, diminuindo o raio atômico e as distâncias internucleares em moléculas. O mesmo ocorre em átomos de muônio (μ^+), que é composto por um antimúon (antipartícula do múon) e um elétron. Esta pesquisa tem por objetivo estudar a formação e a energia eletrônica de sistemas moleculares contendo o antimúon, tais como: μ_2^+ , $H\mu^+$, $D\mu^+$ e $T\mu^+$, comparando suas propriedades eletrônicas com os isotopômeros ionizados do hidrogênio, H_2^+ , D_2^+ e T_2^+ .

MATERIAIS E MÉTODOS

Para efetuar cálculos na estrutura molecular é necessário resolver a equação de Schroedinger. No entanto, esta equação não possui uma solução analítica para sistemas moleculares. Devido a isso, usou-se métodos aproximados, como a aproximação de Born-Oppenheimer (BO), para tornar a solução possível. No entanto, na aproximação de BO a distinção isotópica não é possível. Dessa forma, usa-se *Finite Nuclear Mass Correction* (FMNC), desenvolvida por J. R. Mohallem e colaboradores, possibilitando abordar o problema isotópico em moléculas já no cálculo eletrônico (Gonçalves, 2004). Todos os cálculos foram feitos com o pacote computacional *General Atomic and Molecular Eletronic Structure* (GAMESS) (Schmidt et al., 1993), instalado no Laboratório de Física Teórica e Computacional da UESB. O Hamiltoniano será da seguinte forma:

$$\text{Aprox. BO} \quad H_{BO} = - \sum_{i=1}^n \frac{\nabla_i^2}{2} + V, \quad (1)$$

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

Onde o índice A se refere aos núcleos de massa M_A , e o índice i refere-se aos elétrons e V é o potencial de interação elétron-elétron, elétron-núcleo e núcleo-núcleo e δ_{AB} é o delta de kronecker. O primeiro termo do Hamiltoniano é responsável pelas correções adiabáticas. Este Hamiltoniano é puramente eletrônico e contém informação do movimento nuclear dentro da nossa aproximação. Além disso, no GAMESS usou-se o método o Hartree-Fock (HF) para obter as energias.

Foi obtido a energia de cada sistema, usando a metodologia de FNMC e BO implementados no programa FORTRAN 90 e no GAMESS. Determina-se a distância dos núcleos na geometria de equilíbrio e na região de dissociação destes sistemas.

Usando a metodologia do grupo de pesquisa para produção de animações no Python, a partir dos dados obtidos no GAMESS, foi realizado as simulações em 3D no momento em que a geometria de equilíbrio do sistema molecular exótico é localizada.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os sistemas estudados foram os isotopômeros da molécula de hidrogênio ionizada, tipo XX^+ , onde X é o hidrogênio, deutério, trítio e o antimúon. Na tabela 1, tem-se os resultados obtidos usando a Dinâmica Molecular (MD), método computacional que estuda o movimento e comportamentos de átomos e moléculas.

Tabela 1: Resultados dos cálculos analíticos e da simulação Fortran 90 usando MD para sistemas ABA.

Analítico	Computacional
-----------	---------------

Sistemas	Massa Reduzida (u.a.)	Distância de Equilíbrio (u.a.)	Energia Total (Hartree)
H_2^+	0.999456	2.0028042	-0.5862214
D_2^+	0.999728	2.0025148	-0.5863639
T_2^+	0.999819	2.0024180	-0.5864116
μ_2^+	0.995189	2.0073660	-0.5839859
$H\mu^+$	0.999456	2.0028042	-0.5862214
$D\mu^+$	0.999727	2.0025158	-0.5863634
$T\mu^+$	0.999818	2.0024191	-0.5864111

Fonte: autoras.

Na tabela 2, o sistema converge ficando próximo dos resultados da distância internuclear obtido no Fortran 90. A energia total da molécula apresenta uma pequena diferença no resultado obtido em comparação a Tabela 1. Isso ocorre devido ao método HF, que possui uma maior base que proporciona melhores resultados para a energia.

Tabela 2: Resultados obtidos pelo GAMESS usando HF e a FNMC.

Computacional - FNMC				
Sistemas	Geometria de Equilíbrio Localizada (Z) (ANGS.)	Distância Internuclear (ANGS.)		Energia Total (Hartree)
H_2^+	H = 1.0310581457	1 H	0.0000000 1.0566795 *	-0.6021398210
	H = -0.0256213722	2 H	1.0566795 * 0.0000000	
D_2^+	D = 1.0310027658	1 D	0.0000000 1.0565688 *	-0.6022741611
	D = -0.0255659922	2 D	1.0565688 * 0.0000000	
T_2^+	T = 1.0309843055	1 T	0.0000000 1.0565318 *	-0.6023189588
	T = -0.0255475320	2 T	1.0565318 * 0.0000000	
μ_2^+	μ = 1.0319303737	1 μ	0.0000000 1.0584240 *	-0.6000340190
	μ = -0.0264936002	2 μ	1.0584240 * 0.0000000	
$H\mu^+$	H = 1.0312290467	1 H	0.0000000 1.0570213 *	-0.6011592542
	μ = -0.0257922731	2 μ	1.0570213 * 0.0000000	
$D\mu^+$	D = 1.0311560975	1 D	0.0000000 1.0568754 *	-0.6012377553
	μ = -0.0257193239	2 μ	1.0568754 * 0.0000000	

$T\mu^+$	T = 1.0311305584	1 T	0.0000000	1.0568243 *	-0.6012641860
	$\mu = -0.0256937848$	2 μ	1.0568243 *	0.0000000	

Fonte: autoras.

Na tabela 2, observa-se que há a distinção isotópica no cálculo eletrônico. Ao comparar as moléculas homonucleares, tipo X_2^+ , o sistema T_2^+ possui menor energia. Esse resultado está em total acordo com a metodologia, pois, este sistema é o mais pesado (possui dois nêutrons e um próton em seu núcleo), portanto, é o sistema que mais se aproxima da abordagem de Born-Oppenheimer. Enquanto, verifica-se que o sistema μ_2^+ é o mais leve, portanto a sua energia é a maior. Ao comparar as moléculas heteronucleares, tipo XX^+ , o sistema $T\mu^+$ possui menor energia, enquanto o $H\mu^+$ possui maior energia. Ambos resultados convergem com a metodologia.

Tabela 3: Resultados obtidos pelo GAMESS usando HF e a aproximação BO.

Computacional - BO					
Sistemas	Geometria de Equilíbrio Localizada (Z) (ANGS.)	Distância Internuclear (ANGS.)			Energia Total (Hartree)
H_2^+	H = 1.0309473846	1 H	0.0000000	1.0564580 *	-0.6024085806
	H = -0.0255106111	2 H	1.0564580 *	0.0000000	
D_2^+	D = 1.0309473846	1 D	0.0000000	1.0564580 *	-0.6024085806
	D = -0.0255106111	2 D	1.0564580 *	0.0000000	
T_2^+	T = 1.0309473846	1 T	0.0000000	1.0564580 *	-0.6024085806
	T = -0.0255106111	2 T	1.0564580 *	0.0000000	
μ_2^+	$\mu = 1.0309473846$	1 μ	0.0000000	1.0564580 *	-0.6024085806
	$\mu = -0.0255106111$	2 μ	1.0564580 *	0.0000000	
$H\mu^+$	H = 1.0309473846	1 H	0.0000000	1.0564580 *	-0.6024085806
	$\mu = -0.0255106111$	2 μ	1.0564580 *	0.0000000	
$D\mu^+$	D = 1.0309473846	1 D	0.0000000	1.0564580 *	-0.6024085806
	$\mu = -0.0255106111$	2 μ	1.0564580 *	0.0000000	
$T\mu^+$	T = 1.0309473846	1 T	0.0000000	1.0564580 *	-0.6024085806

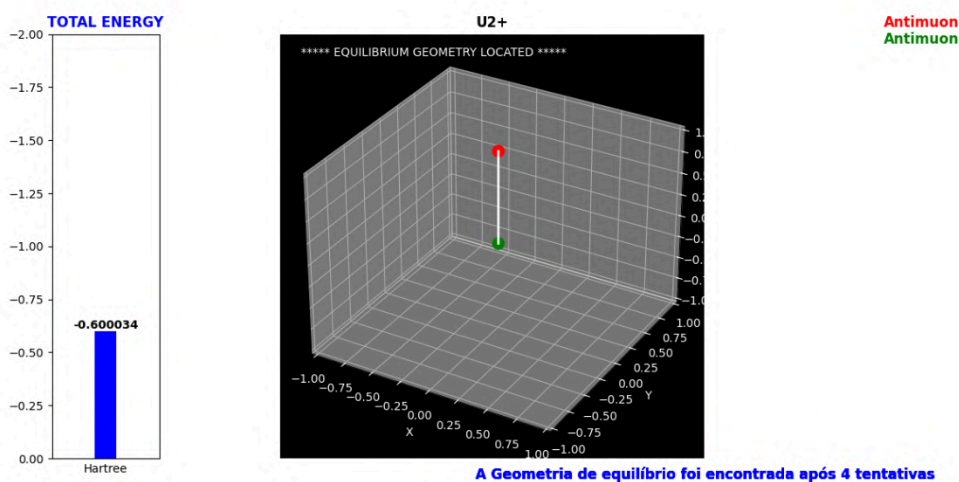
	$\mu = -0.0255106111$	$2\mu = 1.0564580 * 0.0000000$	
--	-----------------------	--------------------------------	--

Fonte: autoras.

Na tabela 3, é possível observar que usando a aproximação BO não há como distinguir esses sistemas a nível eletrônico, pois nesta abordagem as massas dos núcleos são consideradas infinitas.

Outro resultado de destaque obtido, a distinção dos sistemas a partir da sua geometria de equilíbrio. Na figura 1, figura 2, figura 3 e figura 4 é possível observar que os sistemas moleculares possuem resultados próximos, mas com distinções devido a metodologia FNMC.

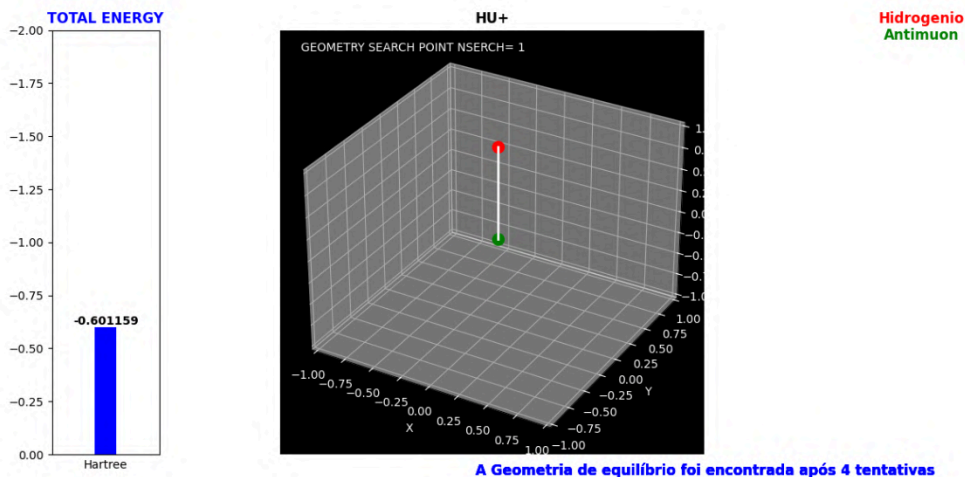
Figura 1: Geometria de Equilíbrio Localizada da Molécula Muônica μ_2^+ .



Fonte: autoras.

A partir da animação no Phyton, encontrou-se a Geometria de equilíbrio localizada da molécula homonuclear ionizada μ_2^+ , dois átomos de muônio (μ^+), contendo dois antimúons e um elétron.

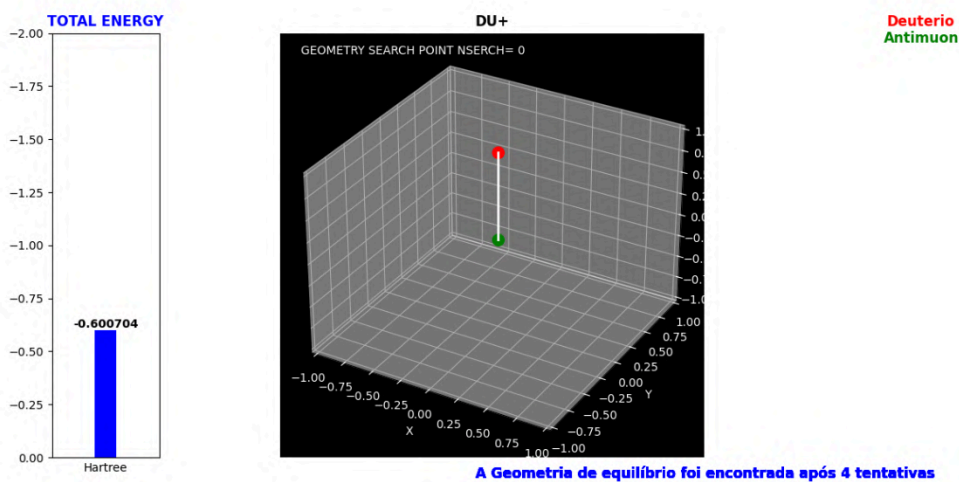
Figura 2: Geometria de Equilíbrio Localizada do Hidrogênio Muônico $H\mu^+$.



Fonte: autoras.

A partir da animação no Phytón, encontrou-se a Geometria de equilíbrio localizada da molécula heteronuclear ionizada $H\mu^+$, contendo um átomo de hidrogênio, um antimúon e um elétron.

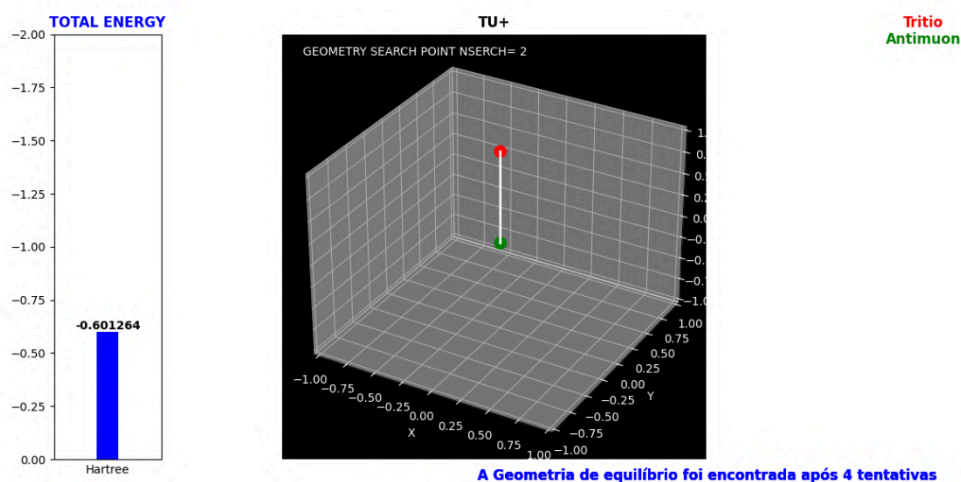
Figura 3: Geometria de Equilíbrio Localizada do Deutério Muônico $D\mu^+$.



Fonte: autoras.

A partir da animação no Phytton, encontrou-se a Geometria de equilíbrio localizada da molécula heteronuclear ionizada $D\mu^+$, contendo um deutério (isótopo pesado e estável), um antimúon (μ^+) e um elétron.

Figura 4: Geometria de Equilíbrio Localizada do Trítio Munico $T\mu^+$.



Fonte: autoras.

A partir da animação no Phytton, encontrou-se a Geometria de equilíbrio localizada da molécula heteronuclear $T\mu^+$, contendo um trítio (isótopo radioativo), um antimúon (μ^+) e um elétron.

CONCLUSÃO

Nesses sistemas, além da interação entre os elétrons e os núcleos, considera-se a interação entre os núcleos. O elétron é menos pesado que o próton, nêutron e antimúon, logo o movimento nuclear é considerado independente (aprox. BO) visto que para o elétron o núcleo não se movimenta. Em vista disso, determinou-se a energia desses

sistemas moleculares exóticos, que embora sejam considerados como sistemas simples, a análise quântica destas, criam uma base para o estudo e compreensão da interação que ocorrem em moléculas complexas. Dessa forma, a metodologia FNMC foi fundamental para o estudo dos isótopos muônicos ionizados, pois foi obtido resultados que proporcionam realizar a distinção isotópica a nível eletrônico, na qual a aproximação de BO não proporciona.

REFERÊNCIAS

BUNGE, Annik Vivier. Introdução a Química Quântica. São Paulo: Editora Blucher, 410 p. 1977.

GONÇALVES, Cristina Porto. Dinâmica Molecular Adiabática de Sistemas Coulombianos de Três Corpos. Orientador: José Rachid Mohallem. 1999. Dissertação (Mestrado) – Mestrado em Física, Universidade Federal de Minas Gerais, Minas Gerais, 1999.

GONÇALVES, Cristina Porto; MOHALLEM, José Rachid. **A new algorithm to handle finite nuclear mass effects in electronic calculations: the ISOTOPE program (ISSN 0192-8651)**. Journal of Computational Chemistry, USA, v. 25, n.14, p. 1736-1739, 2004.

GONÇALVES, Cristina Porto; MOHALLEM, José Rachid. A note on geometry relaxation of molecular positron complexes. **Journal Chemical Physics Letters**. v. 121, p. 5553, 2004.

OSTERMANN, Fernanda. Partículas elementares e interações fundamentais. **Instituto de Física–UFRGS. Porto Alegre**, 2001.

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.