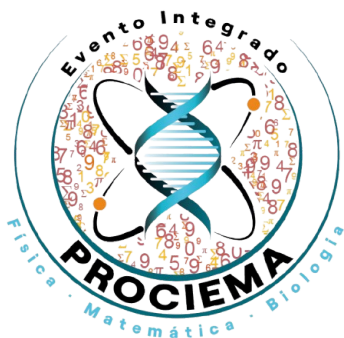




### III EVENTO INTEGRADO PROCIEMA Redes da Vida, como tudo está conectado

#### Estudo da molécula de HD utilizando a Correção de Massa Nuclear Finita e sua importância na Astrofísica.

#### Eixo Temático 5: Estudos e Pesquisas em Física

Emilly Laranjeira Lima Napoli<sup>1</sup>, Cristina Porto Gonçalves<sup>2</sup>

#### Resumo

Este trabalho propõe um estudo computacional da molécula diatômica heteronuclear de hidreto de deutério (HD), com o objetivo de determinar suas propriedades moleculares de interesse para a física molecular e a astrofísica. A molécula de HD desempenha um papel significativo nos processos de resfriamento do universo primordial e na formação das primeiras estrelas, sendo essencial para a compreensão do Big Bang e da história do universo, além de atuar como um importante agente de resfriamento em nuvens moleculares primordiais. No entanto, cálculos sistemáticos de estrutura molecular são geralmente realizados utilizando a separação dos movimentos eletrônicos e nucleares. Durante a resolução do problema eletrônico, os núcleos atômicos são mantidos fixos, empregando-se a aproximação de Born-Oppenheimer. Nessa etapa, não é possível distinguir os isótopos. C.P Gonçalves e colaboradores desenvolveram uma metodologia que permite tratar o problema isotópico já na etapa do cálculo eletrônico, conhecida como correção de massa nuclear finita (*finite nuclear mass correction*). Essa abordagem é importante para descrever com precisão os efeitos isotópicos e a estrutura molecular. Foi implementado um código em Fortran utilizando o programa GAMESS (*General Atomic and Molecular Electronic Structure System*) para determinar as distâncias internucleares e as energias eletrônicas, considerando a correção de massa nuclear finita. Cálculos preliminares indicam que o comprimento de ligação de equilíbrio, a energia eletrônica, o momento de dipolo e as frequências vibracionais obtidas estão em excelente concordância com os valores reportados na literatura, confirmando a validade da abordagem computacional. Essas comparações reforçam a importância da inclusão dos efeitos de massa nuclear finita para a modelagem precisa da molécula de HD. Ao contribuir para uma melhor compreensão do comportamento da molécula de HD, este estudo fortalece a conexão entre estudos quânticos computacionais e pesquisas em astrofísica, enfatizando o papel do HD na evolução do universo primordial.

**Palavras-chave:** Hidreto de Deutério, Física molecular, Astrofísica, Correção de Massa Nuclear Finita, GAMESS

<sup>1</sup> Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, Departamento de Ciências Exatas e Tecnológicas, Vitória da Conquista, Bahia, Brasil

\*e-mail: 202210615@uesb.edu.br

<sup>2</sup> Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, Departamento de Ciências Exatas e Tecnológicas, Vitória da Conquista, Bahia, Brasil

\*e-mail: cgoncalves@uesb.edu.br



PROEX  
Pró-Reitoria de Extensão  
e Assuntos Comunitários



CCFIS  
Colegiado de Física

CCMAT  
Colegiado de Matemática  
Vitória da Conquista

PROCIEMA  
PROGRAMA DE ENSINO EM CIÊNCIAS E MATEMÁTICA  
UNIVERSIDADE ESTADUAL DO SUDOESTE DA BAHIA

## Referências

BORN, M.; OPPENHEIMER, R. *Zur Quantentheorie der Molekeln*. *Annalen der Physik*, Berlin, v. 389, n. 20, p. 457–484, 1927.

GONÇALVES, Cristina P.; MOHALLEM, José R. *A new algorithm to handle finite nuclear mass effects in electronic calculations: the ISOTOPE program*. *Journal of Computational Chemistry*, Hoboken, v. 25, n. 14, p. 1736–1739, 2004.

SCHMIDT, Michael W. *et al.* General Atomic and Molecular Electronic Structure System (GAMESS). *Journal of Computational Chemistry*, Hoboken, v. 14, n. 11, p. 1347–1363, 1993.



**PROEX**  
Pró-Reitoria de Extensão  
e Assuntos Comunitários



**CCFIS**  
Colegiado de Física

**CCMAT**  
Colegiado de Matemática  
Vitória da Conquista

**PROCIEMA**  
PROGRAMA DE ENSINO EM CIÊNCIAS E MATEMÁTICA  
PROGRAMA DE EXTENSÃO