

ESTUDO DE PROPRIEDADES DE SISTEMAS MOLECULARES CONTENDO O HIDROGÊNIO SEUS ISOTOPOS E O POSITRON ¹

Adriane Martins Alves², Cristina Porto Gonçalves³

RESUMO

O estudo de sistemas moleculares é de grande interesse acadêmico, científico e tecnológico, principalmente na área de Física Atômica e Molecular. O Hidrogênio é o elemento mais abundante do universo, compondo 75% da matéria normal por massa e mais de 90% por número de átomos, enquanto o Pósitron vem desempenhando um papel fundamental na física. Essa partícula possui inúmeras aplicações, como por exemplo na Tomografia por Emissão de Pósitrons (PET), na investigação de materiais, identificação da espectrometria de moléculas biológicas; entre outras aplicações que evidenciam a importância de seu estudo. Pensando nisso o projeto teve como objetivo estudar a interação do Hidrogênio com seus isótopos e também dele com o Pósitron, estas ligações entre átomos acabam por construir moléculas que apresentam grande interesse científico. Utilizando de conceitos da mecânica quântica e de uma nova abordagem, 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 incorporados na solução da Hamiltoniana eletrônica tornando possível o estudo de diferentes propriedades. Para o desenvolvimento desta pesquisa, foi utilizado a ferramenta da simulação computacional por meio do software GAMESS (General Atomic and Molecular Electronic Structure System, M.W.Schmidt, K.K. Baldrige, J.A. Boatz, S.T. Elbert, M.S. Gordon, J.H. Jensen, S. Koseki, N. Matsunaga, K.A. Nguyen, S. Su, T.L. Windus, M. Dupuis, J.A. Montgomery J. Comput. Chem. 14 (1993) 1347) e a implementação da Correção da Massa Nuclear Infinita (FNMC, Gonçalves, C. P., Mohallem, J. R., J. Comp. Chem. 25 (2004) 1736) nesse programa. No decorrer desse desenvolvimento observamos como métodos diferentes, bases de código diferentes para cada átomo e aproximações diferentes podem produzir resultados menos ou mais próximos dos obtidos na literatura. A partir dessas análises otimizamos os resultados buscando sempre uma energia de ligação mais próxima possível da encontrada na literatura para assim construir conhecimento acerca de importantes características dessas moléculas, como a geometria de equilíbrio, densidade das cargas em cada posição, distâncias de equilíbrio e de dissociação, entre outras interessantes conclusões para a construção de dados (J. A. C. Martinez, M. Barborini and A. Tkatchenko, J. Chem. Theory Comput. 18 (2022) 2267).

PALAVRAS-CHAVE: Energia, GAMESS, Hidrogênio, Pósitron.

² Estudante 201911860@uesb.edu.br.

³ Orientadora critpg2003@yahoo.com.br