Cálculo de propriedades eletrônicas em diatômicas deuteradas

*Mateus B. Rocha[1], José R. Mohallem[2] e Denise Assafrão[1]

[1]*Departamento de Física, Centro de Ciências Exatas, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, ES, Brasil*
[2]Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG, Brasil.

mat.bergami@gmail.com
dassafrao@gmail.com

A substituição de um Hidrogênio atômico (H) por um Deutério (D) ou um Trítio (T) em moléculas é um importante tema de pesquisa em diversas áreas. Como principal consequência desta substituição podemos citar o aparecimento de um momento de dipolo isotópico, como é o caso da molécula HD. Existem diferentes metodologias teóricas que procuram avaliar os efeitos desta substituição nas propriedades estruturais das moléculas deuteradas e obter o momento de dipolo resultante da substituição. Todas estas metodologias são baseadas na Aproximação Born-Oppenheimer ou seja, a massa nuclear não é considerada na função de onda eletrônica. Consequentemente tais teorias falham na obtenção deste momento de dipolo isotópico. Neste trabalho, apresentamos uma abordagem alternativa em que a massa nuclear é considerada finita e é incluida em todas as etapas do cálculo eletrônico. Como consequência, tanto a energia quanto a função de onda eletrônica carregam informação da massa nuclear e todos os efeitos isotópicos serão bem descritos. Aplicamos esta metodologia na obtenção das curvas de energia potencial para a diatômica H_2 e todas as suas derivadas deuteradas: HD, HT, DT, D_2 e T_2
À partir destas curvas, calculamos os níveis vibracionais e comparamos com resultados disponíveis na literatura. Para as espécies com assimetria de massa, HD, HT e DT, calculamos o momento de dipolo isotópico e o momento de dipolo isotópico mediado vibracionalmente.

Efeitos isotópicos, estados vibracionais, momento de dipolo