

Análise da quebra de simetria em sistemas de isotopólogos

- Poster
- Jackson de Souza Silva, jacksonwx5@hotmail.com

Jackson de Souza Silva - Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia (UESB) Cristina Porto Gonçalves - Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia (UESB)

Neste trabalho demonstramos a quebra de simetria em moléculas diatômicas e poliatômicas. O objetivo foi demonstrar como a substituição de um átomo por um de seus isótopos provoca uma quebra de simetria numa molécula, alterando as Superfícies de Energia Potencial (SEP) de um isotopólogo. A obtenção das SEP usando a metodologia Correção de Massa Nuclear Finita (FNMC – em inglês), desenvolvida por Gonçalves e colaboradores, permite fazer a distinção isotópica entre moléculas com hidrogênio comum e moléculas deuteradas. A Teoria de Grupo é uma ferramenta de grande importância no estudo de sistemas moleculares, pois possibilita fazer a ligação entre argumentos de simetria molecular e propriedades de sistemas moleculares, permitindo inclusive simplificar cálculos mais complicados de Física Atômica e Molecular e Química Quântica. Usamos a Teoria de Grupo para classificar as moléculas e, juntamente com a FNMC, demonstrar matematicamente a quebra de simetria nos isotopólogos estudados. Esta metodologia foi aplicada no estudo de algumas moléculas de interesse astrofísico.

Comentários: