

Átomos de Positrônio em Meios Condensados

L. B. Martins^{1*}, M. Bergami¹, A. Reyes², K. Coutinho¹, M. T. do N. Varella¹

¹Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Rua do Matão 1371 CP 66318,
CEP 05508-090, São Paulo, SP, Brasil

²Department of Chemistry, Universidad Nacional de Colombia, Av. Cra. 30 #45-03,
111321 Bogotá, Colombia

*email: leonardo.bin.martins@usp.br

Neste trabalho é apresentado um estudo numérico da solvatação do átomo de positrônio (Ps) em três líquidos: o metanol, o etanol e a acetonitrila. Para isso, foi utilizado o método QM/MM sequencial, onde primeiro são feitas simulações clássicas (aqui utilizou-se o método de Monte Carlo) seguidas de cálculos quânticos. Foi proposto um campo de força para o Ps seguindo um modelo desenvolvido em nosso grupo de pesquisa para estudar o positrônio hidratado [1]. Porém, antes é necessário propor um campo de força para um elétron solvatado nos três líquidos mencionados acima, o que também foi feito, tendo como base o trabalho de Ludwig et al. [2]. As simulações clássicas para o Ps permitiram computar algumas propriedades termodinâmicas do sistema, como a energia livre de solvatação desse átomo e a energia de relaxação. Com as simulações com mecânica quântica, energias de ligação verticais e os tempos de vida do Ps em metanol foram calculadas. Os resultados sugerem que neste solvente o Ps pode ocupar tanto a cavidade formada no líquido quanto se ligar a uma das moléculas presentes na primeira camada de solvatação, formando um estado de superfície, algo que não havia sido observado para a água [1].

Referências

[1] BERGAMI, Mateus et al. Multicomponent Quantum Mechanics/Molecular Mechanics Study of Hydrated Positronium. *The Journal of Physical Chemistry B*, v. 126, n. 14, p. 2699-2714, 2022.

[2] LUDWIG, Valdemir; COUTINHO, Kaline; CANUTO, Sylvio. Sequential classical-quantum description of the absorption spectrum of the hydrated electron. *Physical Review B*, v. 70, n. 21, p. 214110, 2004.