



UFPE

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA FUNDAMENTAL**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Química com Quarks

Cristiano Costa Bastos

Recife – PE

2007



UFPE

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA FUNDAMENTAL

Química com Quarks

Cristiano Costa Bastos*

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Química da UFPE como parte dos requisitos a obtenção do título de Mestre em Química.

ORIENTADOR: PROFESSOR ANTONIO CARLOS PAVÃO

*Bolsista CNPq

Recife – PE

2007

Bastos, Cristiano Costa

Química com quarks / Cristiano Costa Bastos. - Recife : O Autor, 2007.

48 folhas : il. , graf. , tab.,

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. CCEN.
Departamento de Química Fundamental , 2007.

Inclui bibliografia e anexos.

1. Físico-Química. 2. Química quântica. 3. Química teórica. 4. Hartree-Fock. 5.

Quarks livres. I. Título.

541.3

CDD (22.ed.)

FQ2007-28

Dissertação submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Química do Departamento de Química Fundamental da Universidade Federal de Pernambuco como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Grau de Mestre em Química.

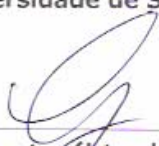
Aprovada:



Prof. Antonio Carlos Pavão
(Orientador)
Departamento de Química Fundamental
Universidade Federal de Pernambuco



Prof. Fernando Rei Ornellas
Instituto de Química
Universidade de São Paulo



Prof. Alfredo Arnóbio de Souza da Gama
Departamento de Química Fundamental
Universidade Federal de Pernambuco

“QUÍMICA COM QUARKS”

por

Cristiano Costa Bastos

Departamento de Química Fundamental
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Universidade Federal de Pernambuco
Recife-PE-Brasil
31 de Julho de 2007

***Este trabalho é inteiramente dedicado à
Thassia Mirelle Cavalcanti.***

AGRADECIMENTOS

À Thassia Cavalcanti, por tudo que representa para mim.

À Adelino Bastos (papai), Dona Marta (mamãe) e meu irmão Rafael Bastos, que com certeza me enriqueceram muito como ser humano através do contato direto, minha família.

À toda família Cavalcanti de Caruaru-PE. Exemplos variados que muito contribuíram na minha jornada de vida até o momento. Em destaque: Lídio e Rejane Cavalcanti.

Ao meu orientador, educador e amigo, professor Antonio Carlos Pavão. Ser humano sem igual, que transformou minha vida acadêmica (e a “salvou” algumas vezes) e que pessoalmente me influenciou como um pai, que mostra os caminhos, assiste nossos tropeços, mas que no momento certo estende a mão para não cairmos. Meu Pai Científico.

Ao alvirrubro (Mestre) Joacy Vicente Ferreira (ou “Nambu” do DQF), que me ensinou algumas facetas fundamentais dos meandros da pesquisa científica e do comportamento humano. Meu Tio Científico.

Meu então orientador em métodos semi-empíricos, Professor Gerd Bruno da Rocha da UFPB.

Aos colegas de graduação e de pós-graduação que no dia-a-dia colaboraram com a minha formação, para representá-los destaco: Júlio Cosme, Ana Rosa, Daniel Dickens, Eduardo Castro, Victor Rusu., Lourinaldo Júnior e Marcus Pereira dos Santos (Parish).

Ao professor Simas e os membros de seu grupo de pesquisa, o qual fiz parte, e tive uma profícua convivência. Em especial Ricardo de Oliveira Freire.

Ao amigo professor Ramón Oreste Mendoza Ahumada (Departamento de Matemática), pelos estudos e atividades de extensão orientadas e que tão bem fundamentaram minha formação.

A José Soares da Silva, o “Papa da Xilogravura”. Dila é, por minha adoção, meu padrinho em literatura de cordel (atividade que utilizei para a divulgação e ensino de ciências).

Aos artistas e colaboradores culturais que participaram da minha trajetória, como os Membros da Academia Caruaruense de Literatura de Cordel e da banda Forró de

Cana. Pessoas que facilitaram muitas das noções de divulgação científica que busco adquirir.

Aos professores dos departamentos de química fundamental, matemática e física com quem tive a honra de conviver e que de certo enriqueceram bastante minha formação discente e humana, os quais represento e destaco: Ricardo Luiz Longo, Severino Alves Júnior, William Ricardo Rocha, Francisco Brady e Sérgio Coutinho.

Aos funcionários da secretaria geral e de pós-graduação, como Arineide e Deyse, que sempre atenderam com eficiência assuntos referentes e favoreceram a um bom andamento meu curso. Patrícia e Gisele, profissionais dedicadas e simpáticas.

O amigo e rubro-negro Maurílio, um histórico e simpático membro da secretaria de pós-graduação e da alma deste departamento.

Aos funcionários em geral que, em última análise são os que tornam agradável nossa estada neste departamento, dentre os quais destaco: Senhor Welligton.

À agência financiadora CNPq pela concessão de auxílio financeiro.

RESUMO

Algumas propriedades da química de quarks podem ser obtidas realizando cálculos *ab initio* Hartree-Fock para átomos com carga nuclear fracionária e moléculas formadas por estes átomos.

Obtivemos o estado fundamental e o primeiro estado excitado para os átomos de sódio, lítio, berílio e magnésio interagentes com quarks. Isto sugere que transições eletrônicas podem ser usadas como guia para detecção de quarks livres.

Analizamos a variação da energia de ligação eletrônica com a carga nuclear para as séries isoeletrônicas de átomos com carga nuclear fracionária $A^{\pm 2/3}$ e $A^{\pm 1/3}$ ($A = \text{H, Li, Na, P and Ca}$). Isto mostra que partículas de cor não confinadas preferem se ligar a átomos pesados e o par quark-antiquark pode ser estabilizado na presença da matéria atômica.

Palavras-chaves: calculos *ab initio*; átomos de carga nuclear fracionária; química de quarks.

ABSTRACT

Some properties of quark chemistry are obtained by performing accurate *ab initio* Hartree-Fock calculations on fractionally nuclear charged atoms and molecules formed by these atoms.

Ground and first excited states of sodium, lithium, beryllium and magnesium atoms with quarks attached to the nucleus are obtained. It is suggested that the electronic transition can be used as a guide in searching for free quarks.

The variation of binding electronic energy with nuclear charge in the isoelectronic series of fractionally nuclear charged atoms $A^{\pm 2/3}$ and $A^{\pm 1/3}$ ($A = \text{H, Li, Na, P and Ca}$) is analyzed. It is found that unconfined colored particles prefer to bind with heavy atoms and that quark-antiquark pairs can be stabilized in presence of the atomic matter.

Keywords: *ab initio* calculations; fractionally nuclear charged atoms; quark chemistry.

ÍNDICE

Resumo

1. Do átomo de Dalton aos quarks livres.....	11
1.1 Modelo de Quarks.....	12
1.2 Quarks Livres.....	16
1.3 Cálculos Envolvendo Quarks Livres.....	18
1.4 Nova Química de Quarks.....	20
2. Teorias e modelos.....	22
2.1 Modelo de Bohr.....	23
2.2 Sistemas Multieletrônicos.....	23
2.3 A Equação de Schrödinger.....	24
2.4 A aproximação Born-Oppenheimer.....	25
2.5 Teoria do Orbital Molecular.....	27
2.6 Método Hartree-Fock-Roothaan.....	28
2.7 Funções de Base.....	32
3. Novas interações de quarks com a matéria.....	34
3.1 Interações da matéria atômica com Quarks.....	35
3.2 Energias de interação entre átomos com o par quark-antiquark..	37
3.3 Espectroscopia Eletrônica para a detecção de quarks livres.....	39
3.4 Sistemas Exóticos.....	40
3.5 Molécula de Hq_2	41
3.6 Molécula de Hq_2O	45
4. Conclusões.....	46

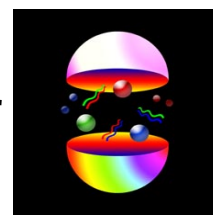
Referências

Anexos

Capítulo 1

Do átomo de Dalton aos quarks livres

Neste capítulo faremos uma introdução ao modelo de quarks e algumas possíveis implicações para uma nova química de quarks. Na seção 1.1, o modelo de quarks será descrito de



forma sucinta acompanhado de alguns fatos históricos que o antecederam e que de alguma forma contribuíram para sua formulação. Falaremos sobre teorias relacionadas com as quatro forças da natureza e como estas implicam no estudo da física e da química em âmbitos gerais. Na seção 1.2, discutiremos a possibilidade de existência de quarks livres, uma vez que em princípio quarks só podem ser encontrados confinados. Neste estado eles encontram-se ligados pela força forte formando, por exemplo, bárions e mésons, a saber, $q_1q_2q_3$ em bárions e q_1q_2 em mésons. No item 1.3, citaremos exemplos de trabalhos teóricos que tratam os quarks fora do ambiente confinado. A última parte desta introdução, seção 1.4, descreve perspectivas para a química de quarks, utilizando sistemas atômicos e moleculares interagentes com quarks livres. Anunciaremos alguns de nossos objetivos no tratamento destes sistemas, como possíveis implicações cosmológicas, um mecanismo de estabilização do par quark-antiquark e uma proposta para detecção de quarks livres pela via espectroscópica.

1.1 Modelo de Quarks

A química tem se aprofundado nos conhecimentos acerca da estrutura das substâncias, visando melhor compreendê-la. Dessa maneira, a evolução da teoria atômica nos séculos XIX e XX provocou verdadeiras revoluções na química. Via-se com o avanço da pesquisa experimental o “nascimento” da química orgânica, e o desenvolvimento da inorgânica e físico-química. Porém, apenas com a teoria da ligação química de Linus Pauling esta ciência se estabeleceria para um futuro desenvolvimento planejado. Utilizando a teoria quântica, Pauling descreve de forma até hoje satisfatória as ligações químicas. Podemos perceber que os modelos teóricos podem ajudar o desenvolvimento experimental. Neste sentido, buscamos estudar alguns aspectos acerca de como a matéria poderia interagir com quarks livres.

No século XIX, acreditava-se que um átomo teria dimensão aproximada de 10^{-8} cm. Estudos com tubos de raios catódicos colaboravam definitivamente com o conhecimento acerca do que o irlandês George Stoney¹ chamou de *elétron*. Como se descobriu mais adiante, o elétron é a partícula fundamental para que ocorra uma ligação química. Por sua vez, Joseph John Thomson, utilizando ampolas de Crookes, percebeu que os raios catódicos seriam formados por estas partículas de carga negativa, calculou assim a razão de sua carga-massa. Thomson deduziu ainda que o elétron estaria presente em todas formas de matéria, o que implicava dizer que ele pertencia à própria estrutura atômica.

Quase no mesmo período de J. J. Thomson, o cientista Wilhem Wien realizava experiências com raios catódicos identificando relação entre a carga-massa de núcleos de hidrogênio, que nada mais eram que *prótons*. O modelo atômico seria posto por Thomson² como “um pudim de passas”, com cargas positivas entremeadas de elétrons, formando uma “sopa” eletromagnética, o que para as leis da física da época era improvável.

Em 1900, o alemão Max Planck buscava compreender fenômenos de emissão radiativa de corpos aquecidos, até então sem um modelo satisfatório. Utilizando leis clássicas da mecânica e da estatística, chegou a uma relação surpreendentemente quantizada para a energia, mas que parecia resolver de forma conclusiva o problema. Mais tarde Albert Einstein usa a teoria quântica de Planck para explicar o efeito fotoelétrico. Einstein explica dizendo que ao incidirmos radiação sob uma superfície

metálica, os elétrons seriam ejetados devido ao choque de *quanta* de luz, os chamados *fótons*.

Em 1911, é lançado o modelo atômico de Rutherford, com a parte positiva do átomo sendo identificada também por sua relação carga-massa. Um núcleo de dimensão bem definida formado por prótons e orbitado pelos elétrons. Niels Bohr através de postulados ousados, embora carentes de justificações precisas, consegue resolver algumas inconsistências deste modelo, explicando inclusive de maneira exata o espectro do hidrogênio.

Algumas questões, porém, não tinham solução. A existência de isótopos, por exemplo, e espectros de átomos multieletrônicos não eram devidamente explicados pelo modelo de Bohr. Novas descobertas acerca de fenômenos variados prosseguiram e os avanços teóricos chegaram a um nível que era possível, e de maneira satisfatória, explicar diversos aspectos da estrutura da matéria. Uma revolução científica comparável a momentos históricos como as formulações de Isaac Newton no século XVII. A mecânica quântica era agora uma teoria que sintetizava e alavancava toda uma visão de mundo e de tudo no que nele é formado. Propriedades de átomos e moléculas passaram a ser fundamentados pelos postulados da teoria quântica.

Variadas pesquisas experimentais a esse tempo também evoluíram de forma significativa e em relativa concordância com os aspectos teóricos recém desenvolvidos. A teoria indicava a existência de novas partículas compondo o universo, e paralelamente os experimentos cobravam novas interpretações em seus resultados. Até 1932, os tijolos básicos da matéria já haviam sido postos: o elétron, o próton e o nêutron. Com o passar dos anos, mais partículas foram sendo propostas e identificadas, o que a certa altura começou a causar um desconforto epistemológico, devido ao elevado número já conhecido.³ Para a química, essas novas estruturas revelam interesse, uma vez que sua descrição teórica está no cerne do conceito de estrutura e modificações da matéria. Alimenta estudos de suas influências em processos químicos, confirmada em variadas pesquisas.

Experimentos em aceleradores e detectores de raios cósmicos começaram a mostrar que além do nêutron, próton e elétron, centenas de outras partículas habitavam nosso universo.⁴ Surgia a necessidade de um modelo que conseguisse classificar de forma clara essas partículas. Essa tarefa não era fácil. O número exagerado de objetos com poucas características em comum frustrava as tentativas de organizá-los em grupo. Era necessário uma quantidade quase independente de parâmetros classificatórios e isso

era extremamente deslegante. Obrigava pesquisadores a repensarem o próprio conceito de indivisibilidade da matéria que se tinha até então. Semelhante ao que ocorrera no final do século XIX e início do século XX, em relação a indivisibilidade do átomo.

Pesquisas buscavam saber sobre as verdadeiras unidades fundamentais da natureza, e se estas poderiam unir de forma concisa grupos de partículas até então dissociados. Surge então em 1964 o modelo de quarks,^{3,4} uma proposta que considera os hádrons compostos por partículas de carga fracionária, cada uma com três valores possíveis de um novo número quântico denominado *cor*. São os **quarks**, compostos de 6 sabores: u, d, c, t, s e b, cujas cores possíveis são verde, azul e vermelho. Partículas com três quarks (qqq) seriam bárions (hádrons de spin semi-inteiro), englobando dentre centenas de partículas o próton e o nêutron, respectivamente com a configuração *uud* e *udd*. O segundo grupo possível seriam os mésons (hádrons de spin inteiro), em geral menos pesados que os bárions, formados por um par quark-antiquark (qq), como o méson descoberto experimentalmente pelo físico brasileiro César Lattes, o méson *pi*.

A existência dos quarks foi determinada inicialmente de maneira indireta. A partir de um procedimento experimental semelhante ao utilizado por Rutherford⁴ para o caso atômico, pode-se identificar a estrutura do próton. Esse processo é chamado “espalhamento inelástico profundo”, nele as partículas são observadas por meio de assinaturas, uma maneira indireta de detecção. Os quarks d e u foram os primeiros detectados, uma vez que necessitam de menor quantidade de energia para serem identificados. Assim, na década de 70, o acelerador da Universidade de Stanford nos Estados Unidos da América (EUA), abria a era experimental para observação de quarks. Em 1995 foi anunciado pelo laboratório Fermilab nos EUA a detecção do sexto quark, o chamado quark *top*, o que fortaleceu o modelo padrão. Era esperado pela teoria que o quark top, por ser mais pesado, fosse o mais difícil de ser detectado, ainda que indiretamente. Até então a teoria de quarks era “top less” e carecia da confirmação experimental de sua existência. Este quark tem uma massa da ordem de 10 GeV, cerca de 200 vezes a massa do próton.

Os demais tijolos fundamentais da natureza seriam os léptons e as partículas transportadoras das quatro forças fundamentais da natureza. As forças da natureza que tratariam de interagir as partículas fundamentais e seus constituintes, foram classificadas em quatro, cada uma com sua respectiva partícula transportadora. A força eletromagnética (posteriormente unificada à força fraca) seria transportada pelo fóton, a força forte pelo glúon, a força fraca pelos bósons vetoriais e a força gravitacional pelo

gráviton. Sem estrutura interna, os léptons seriam também seis: o elétron, o múon, o táu, e seus respectivos neutrinos. Os três primeiros possuem massas bastante diferentes, porém, a mesma carga elétrica ($-1e$). Os neutrinos possuem praticamente massa de repouso nula (mas não desprezível) e carga zero.

Muitas propriedades dos hadrons já foram calculadas pelo modelo de quarks como o raio do próton.⁵ Algumas características dos quarks são de interesse fundamental neste trabalho. As massas dos quarks, por exemplo, ainda não são bem conhecidas, dependendo da forma como são calculadas podem ser obtidos valores distintos. Cargas fracionárias são um consenso quando tratamos de quarks confinados, porém, algumas dúvidas surgem quando se imagina estes em ambiente livre, talvez possuam cargas inteiras.

Com esse elenco de partículas, talvez elementares, consegue se explicar a estrutura de toda a matéria conhecida do universo, consolidando até o presente momento o Modelo Padrão das Partículas Elementares (embora várias questões ainda estejam em aberto).

Vejamos na tabela 1.1 um breve resumo da classificação atual das partículas e forças fundamentais segundo o modelo padrão.

Tabela 1.1 As quatro forças fundamentais da natureza.

Gravidade	Eletromagnética Eletrofraca	Fraca	Forte
gráviton	fóton	bósons vetoriais	glúon
todas	quarks e léptons Carregados	quarks e léptons	quarks e glúons

Começando pela força gravitacional cujos efeitos são sentidos por toda a matéria e antimatéria existente, vemos ainda as forças fraca e eletromagnética unidas em uma só, a chamada *força eletrofraca*, e o glúon, partícula carregadora da força forte e única a sentir seu próprio efeito. Para a Química a força eletrofraca seria a mais importante, neste sentido as cargas são fundamentais.

Vejamos na tabela 1.2 um resumo dos dois grupos de quarks segundo a carga ($+2/3e$ e $-1/3e$) e as três cores possíveis para cada quark(vermelho, azul e verde).

Tabela 1.2. Os seis sabores e três cores possíveis dos quarks conhecidos.

$+2/3e$	u u u up	c c c charm	t t t top
$-1/3e$	d d d down	s s s strange	b b b bottom

As cargas fracionárias $+2/3e$ e $-1/3e$ formam dois grupos de três sabores cada. São as três gerações de quarks cuja ordem de detecção experimental segue da segunda a quarta coluna da tabela 1.2.

Uma questão em aberto, e até certo ponto polêmica, é a possibilidade de existência de quarks livres, e a partir daí, como seriam as interações destes entre si e com a matéria ordinária. Alguns destes aspectos nortearam os trabalhos desenvolvidos e apresentados nesta dissertação.

1.2 Quarks Livres

De maneira muito intensa vêm sendo realizadas pesquisas que levam em conta quarks fora da matéria hadrônica, desde a publicação do modelo em 1964.

Quarks livres ainda não foram identificados, nem presente na matéria ordinária compondo algum sistema. Controvérsias à parte, segundo o modelo padrão o confinamento é um postulado e, em princípio, a maioria dos físicos não vêem razão para que isso seja modificado. Porém, variadas pesquisas desde os anos 70 do século XX, têm sido feitas considerando esta possibilidade, mesmo dentro da teoria de campos específica para quarks, a Cromodinâmica Quântica.⁶

Recentemente, em artigo bastante detalhado, Batra, Dobrescu e Spivak⁷ estudaram de forma clara, condições teóricas para estender o modelo padrão e admitir possibilidades para existência de quarks e glúons livres. Talvez os quarks tenham estrutura interna, ou ainda, o desconfinamento ser possível através de experimentos em física de altas energias. Acredita-se que a energia de 200MeV estaria relacionada com a temperatura de transição para o desconfinamento. Isso quer dizer que podemos esperar

dos novos aceleradores, com energias da ordem de TeV (teraeletronsvolt), novidades para a formação de estados plasmódicos quark-glúon, a chamada sopa de quarks, e também provavelmente quarks livres interagentes ou não.

Vários artigos⁸ trazem o estudo de quarks fora do ambiente hadrônico. A carga dos quarks livres, por exemplo, pode não ter exatamente os valores indicados pelo modelo padrão. Alguns postulam a possibilidade de as cargas assumirem valores distintos e até inteiros¹⁰ (uma vez que o modelo padrão ainda não consegue explicar de forma satisfatória a origem desta grandeza). Os quarks inicialmente livres poderiam interagir com átomos e moléculas ou até mesmo entre si de forma diferente de quando confinados.

Basicamente são três as vertentes relativas a estes estudos: cálculos teóricos de quarks interagentes, estudos em aceleradores e detecção experimental na matéria natural.

No observatório Kamiokande II, estudos¹¹ não detectaram nenhum indício da existência de cargas fracionárias, porém as buscas continuam, uma vez que novos fatos cosmológicos são enunciados diariamente e as tecnologias vão se modificando garantindo novas perspectivas para aquisição de dados.

Outro aspecto que consideramos relevante para este trabalho são algumas implicações cosmológicas devido a sistemas atômicos diferenciados. Após o big-bang em certo momento, quarks e glúons se encontravam livres e apenas posteriormente passaram a se juntar formando os hádrons. Essa passagem pode não ter sido de forma tão homogênea, talvez quarks não confinados coexistiram com matéria hadrônica já formada e por nossa consideração, poderiam ter interagido. Sistemas ligados de quarks com hádrons e átomos podem ter existido mesmo que por um tempo de vida curto. Estas possibilidades podem, a nosso ver, favorecer a estabilização de quarks e glúons. Tais interações implicariam em temperaturas mais altas para esta fase do universo, como mostram nossos cálculos adiante.

1.3 Cálculos Envolvendo Quarks Livres

Várias previsões teóricas visando identificar quarks livres e até mesmo estudar possíveis interações destes com a matéria atômica ou molecular já foram feitas e muitas estão em andamento.⁸ Os cálculos realizados até o momento são em geral de sistemas atômicos e moleculares, quarks interagindo com a matéria.

Cálculos atômicos com carga nuclear fracionária bastante refinados foram realizados ainda nos anos 90 por Pavão *et al.*,¹² estudando os estados fundamental e excitados de átomos de sódio, com o objetivo de estabelecer valores para possíveis transições $3p(^2P) \rightarrow 3s(^2S)$ no espectro de emissão. Foram realizados cálculos em nível CI otimizando-se os expoentes das funções de base para o orbital d. A Fig. 1.1 abaixo traz o gráfico relativo às transições destes sistemas fracionários.

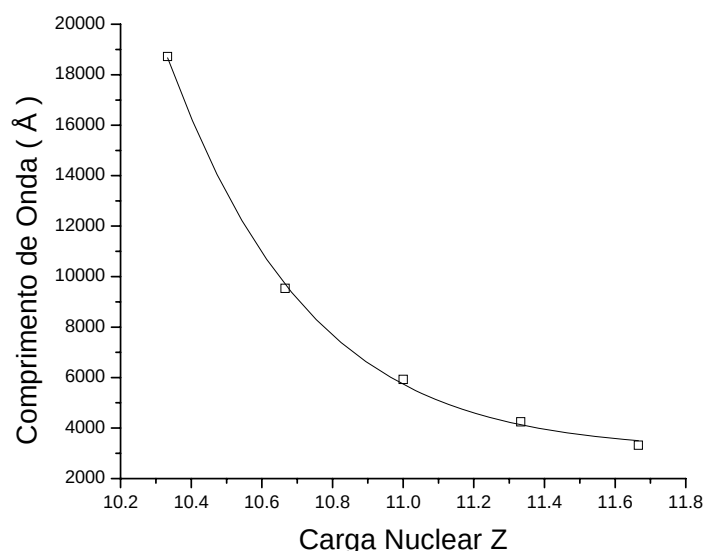


Figura 1.1. Comprimento de onda associado do átomo de sódio e seus sistemas de carga nuclear fracionária

Bandas em determinadas cores do espectro visível mudam e podem ajudar a espectroscopia a encontrar quarks livres. A conhecida linha amarela do sódio se desloca para a região do violeta, quando da presença do $\underline{d}$ ($+1/3e$) no núcleo. As linhas caem na região do infravermelho quando os quarks $\underline{d}$ ($-1/3e$) e $\underline{u}$ ($-2/3e$) estão aderidos a matéria nuclear.

Vemos na tabela 1.3 que os resultados desse trabalho, no que se refere a potenciais de ionização destes sistemas, estão em boa concordância com curvas obtidas por interpolação de dados experimentais feita por Lackner e Zweig.¹³

Tabela 1.3. Potenciais de ionização (MJ/mol) calculados resultados de uma interpolação de dados experimentais para os sistemas Naq, Na e Naq.

Z	RHF	Interpolação
11.67	1.11	1.13
11.33	0.79	0.81
11	0.5	0.5
10.67	0.26	0.26
10.33	0.07	0.1

Observou-se nesse artigo que os resultados dos cálculos utilizando métodos de química quântica foram satisfatórios se comparados com resultados anteriores e experimentais.

Uma química de quarks nasce logo após os primeiros estudos de física de partículas utilizando a teorias de quarks.¹⁴ Em um dos trabalhos iniciais, Lackner e Zweig montam um arcabouço bastante interessante acerca de mudanças de propriedades periódicas dos elementos químicos, devido à presença de quarks não confinados aderidos na matéria nuclear. A tabela 1.4 abaixo traz alguns desses resultados obtidos por Lackner e Zweig. A eletronegatividade calculada pela diferença entre a energia do sistema neutro e do seu ânion, a dureza como a metade da diferença entre a eletronegatividade e o potencial de ionização.

Tabela 1.4. Eletronegatividade e dureza para o átomo de cloro e seus possíveis sistemas de carga nuclear fracionária

Carga Nuclear	Eletronegatividade	Dureza
16,3333	1,46	3,85
16,6667	4,68	4,26
17	8,32*	4,68*
17,3333	12,37	5,10
17,6667	16,85	5,51

*Experimental: 7,31 e 4,70.

Schaad *et al*¹⁴ realizaram cálculos para alguns sistemas com átomos de núcleo fracionário, simbolizados aqui por Aq e $A\bar{q}$, onde A é o símbolo do elemento e q o valor da carga fracionária adicionada ao núcleo. Podemos inclusive comparar estes resultados a alguns obtidos neste trabalho. Calcularam inclusive moléculas contendo átomos quarkônicos. Porém, como veremos mais adiante, não realizaram o estudo da molécula de água contendo átomos quarkônicos.

Em trabalho desenvolvido por Cacelli e Rizzo¹⁵ foram estudadas propriedades da molécula de hidrogênio com um dos átomos do tipo Aq ou $A\bar{q}$. A presença de quarks ou antiquarks nas várias cargas ($\pm 1/3e$ e $\pm 2/3e$) modificam de forma significativa algumas propriedades destas moléculas como energia, densidade eletrônica, distância de ligação entre outras.

Quarks formando sistemas ligados com átomos como pseudomoléculas também constam nos vários trabalhos considerando quarks desconfinados. Gordon e Tien¹⁶ construíram potenciais específicos e calcularam sistemas como uma molécula formada por um quark d e um átomo de hélio.

Estas propostas indicam diversas vias para detecções futuras de quarks livres, trazendo assim perspectivas inovadoras para a química de quarks.

1.4 Nova Química de Quarks

Para uma química de quarks, buscamos calcular sistemas atômicos com quarks interagentes de formas variadas. Estudamos as possíveis interações de quarks e antiquarks com a matéria a partir das energias de sistemas Aq (átomo com quark q ligado ao núcleo), A e $A\bar{q}$ (átomo com antiquark $\bar{q}$ ligado ao núcleo). Calculamos também algumas moléculas como parte do contexto da química de quarks, estudando suas geometrias e outras propriedades.

Algumas interações podem ser consideradas como fundamentais para o processo de formação da matéria no universo.^{17,18} Os núcleos de hidrogênio ao formarem sistemas ligados com elétrons, podem ser entendidos como os primeiros sistemas eletrônicos conhecidos ou aceitos segundo as atuais teorias cosmológicas.

Neste trabalho, consideramos que os quarks podem ter participado da formação de sistemas atômicos de forma não convencional (desconfinados). Vias espectroscópicas são indicadas a partir do cálculo das linhas características de sistemas

quarkônicos. O caso do sódio foi aperfeiçoado e outros átomos são tratados como proposta de detecção de quarks livres.

Quando o sistema for hidrogenóide, podemos utilizar simplesmente o modelo de Bohr para o cálculo da energia eletrônica total e raio atômico. Átomos multieletrônicos e moléculas podem ser calculados usando o método Hartree-Fock-Roothan (HF), através do programa *Gaussian 98*.¹⁹

Capítulo 2

Teorias e modelos

Neste capítulo, faremos uma breve discussão acerca das teorias e modelos que foram utilizados na dissertação. O modelo de Bohr servirá para os cálculos de sistemas hidrogenóides e semelhantes, como será visto adiante. Este modelo permite, por exemplo, estudar as energias dos sistemas Aq, por exemplo, e como varia o raio de atômico em função da carga nuclear. Traremos em seguida a teoria Hartree-Fock-Roothann que trata com sucesso átomos multieletrônicos e moléculas. Iniciaremos mostrando a equação de



Schrödinger e os termos do operador de energia total, o hamiltoniano, para moléculas em geral. A aproximação Born-Oppenheimer será abordada como forma de explicarmos sua conveniência no tratamento do movimento relativo entre núcleos e elétrons. Já no final do capítulo indicaremos como são construídas as funções de base que serão utilizadas para o cálculo das propriedades propostas nesta dissertação.

2.1 Modelo de Bohr

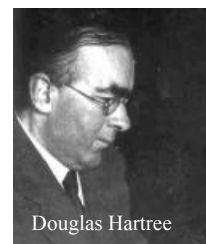
Vários dos sistemas de interesse inicial nesta dissertação são simples e com apenas dois corpos. O tratamento pode ser facilitado utilizando-se o modelo de Bohr para calcularmos a energia total, e como já foi bastante comprovado, com o êxito em relação aos dados experimentais obtidos. Da mesma forma como o espectro do átomo de hidrogênio pôde ter grande parte de suas linhas previstas e energias eletrônicas calculadas através do modelo de Bohr, podemos fazer o mesmo para sistemas de interesse como um quark e seu respectivo antiquark ligados ou um átomo de hidrogênio com um quark qualquer ligado ao seu núcleo. A energia é dada por:

$$E = -\frac{\mu q_1^2 q_2^2}{8\epsilon_0 h^2 n^2} \quad (2.1)$$

Este modelo é bastante conveniente para uma boa parte dos cálculos cujos resultados são mostrados nesta dissertação. Na equação 2.1 podemos fazer variar qualquer um dos parâmetros independentemente ou simultaneamente: carga, massa reduzida, nível eletrônico, possibilitando diversas aplicações para nosso trabalho.

2.2 Sistemas Multieletrônicos

Para o cálculo de sistemas multieletrônicos utilizamos o método Hartree-Fock. Ainda no início do desenvolvimento da mecânica quântica, o professor Douglas Hartree passou a se preocupar em calcular sistemas atômicos multieletrônicos. Assim, começou o desenvolvimento de um dos métodos que ainda é bastante utilizado para sistemas atômicos e até moleculares.



Para sistemas moleculares utilizamos o método Hartree-Fock-Roothaan,¹⁹ que aqui é conveniente e satisfatório, uma vez que tratamos apenas moléculas simples.

Assim, neste capítulo, apresentaremos algumas considerações sobre estes formalismos teóricos e estrutura do cálculo aplicada ao tratamento de átomos e moléculas com núcleo(s) de carga(s) fracionária(s).

2.3 A Equação de Schrödinger

A equação de Schrödinger é dada pela seguinte expressão:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, R; t) = H \Psi(r, R; t) \quad (2.2)$$

onde H é o operador hamiltoniano e $\Psi(r, R; t)$ é a função de onda, r e R o conjunto de coordenadas espaciais dos elétrons e núcleos respectivamente e t é o tempo. O hamiltoniano pode ser escrito como a soma dos operadores de energia cinética(T) e potencial(V),

$$H = T + V \quad (2.3)$$

Quando o sistema é estacionário, é possível considerar a função de onda como o produto de duas funções,

$$\Psi(r, R; t) = \Phi(r, R) f(t) \quad (2.4)$$

onde a parte da função produto cuja variável é apenas o tempo é dada por,

$$f(t) = f(t_0) e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \quad (2.5)$$

e a equação do autovalor para a função $\Phi(r, R)$ nos fornece as energias E dos estados estacionários,

$$H\Phi(r, R) = E\Phi(r, R) \quad (2.6)$$

sendo a função de onda total,

$$\Psi(r, R; t) = \Phi(r, R) e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \quad (2.7)$$

Os auto-estados de energia são ditos estacionários quando a densidade de probabilidade não depende do tempo.

O operador hamiltoniano não-relativístico na sua forma explícita para uma molécula é,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha} \frac{1}{m_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2 + \sum_{\alpha} \sum_{\beta > \alpha} \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta} e^2}{r_{\alpha\beta}} - \sum_{\alpha} \sum_i \frac{Z_{\alpha} e^2}{r_{i\alpha}} + \sum_j \sum_{i > j} \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (2.8)$$

onde os índices α , β , i e j referem-se, respectivamente, aos núcleos e elétrons. O primeiro termo é o operador para a energia cinética dos núcleos; o segundo termo é o operador para energia cinética dos elétrons; o terceiro termo é o operador da energia potencial de repulsão entre os núcleos, $r_{\alpha\beta}$ sendo a distância entre os núcleos α e β com número atômico Z_{α} e Z_{β} ; o quarto termo é o operador da energia potencial de atração entre os elétrons e os núcleos, $r_{i\alpha}$ sendo a distância entre o elétron i e o núcleo α ; o último termo é a energia potencial da repulsão entre os elétrons i e j , separados pela distância r_{ij} e $\hbar$ é a constante de Planck dividida por 2π .

2.4 A aproximação Born-Oppenheimer

Seja $\Psi(r, R)$ a função independente do tempo que trata simultaneamente das partes eletrônica e nuclear. A separação de Born-Oppenheimer, ou aproximação adiabática, implica ser possível considerar $\Psi(r, R)$ igual ao produto de duas novas funções, uma representando a parte eletrônica e a outra a parte nuclear.

$$\Psi(r, R) \approx \Psi_{el}(r, R) \Psi_N(R) \quad (2.9)$$

Nesta equação $\Psi_{el}(r, R)$ é a função de onda eletrônica parametricamente dependente das coordenadas dos núcleos ($\{R\}$), e $\Psi_N(R)$ é a função de onda nuclear.

A equação do auto-valor para a parte eletrônica é então:

$$H_{el} \Psi_{el}(r, R) = E(R) \Psi_{el}(r, R) \quad (2.10)$$

H_{el} sendo o hamiltoniano eletrônico dado por:

$$H_{el} = T_{el} + V(r, R) = -\frac{\eta^2}{2m_e} \sum_{i=1}^{N_e} \nabla_i^2 + V(r, R) \quad (2.11)$$

$E(R)$ e Ψ_{el} são computados em valores das coordenadas nucleares $\{R\}$. As soluções desta equação determinam uma superfície de energia potencial (PES) para os vários estados eletrônicos. As energias $E(R)$ assim determinadas são usadas como energias potenciais para investigar o movimento nuclear. As funções de onda eletrônicas dependem fortemente das distâncias elétron-núcleo e elétron-elétron.

A equação nuclear de Schrödinger é,

$$H_N \Psi_N(R) = \varepsilon \Psi_N(R) \quad (2.12)$$

onde H_N é o hamiltoniano nuclear em função apenas das coordenadas nucleares.

$$H_N = -\sum_{\alpha=1}^{N_N} \frac{\eta^2}{2M_\alpha} \nabla_\alpha^2 + E(R) \quad (2.13)$$

A aproximação Born-Oppenheimer não é exata porque negligencia completamente os termos de acoplamento. O produto das funções de onda é exatamente,

$$H \Psi_{el} \Psi_N = B + \varepsilon \Psi_{el} \Psi_N \quad (2.14)$$

Com B, o termo de acoplamento, sendo definido por,

$$B = \sum_{\alpha} -\frac{\eta^2}{2M_\alpha} [\Psi_N \nabla_\alpha^2 \Psi_{el} + 2(\nabla_\alpha \Psi_{el} \nabla_\alpha \Psi_N)] \quad (2.15)$$

Os termos de acoplamento são relativamente pequenos, uma vez que o termo com a derivada da função de onda eletrônica possui denominadores pequenos devido às massas nucleares muito maiores que as massas dos elétrons.

2.5 Teoria do Orbital Molecular

O conceito básico do método de orbitais moleculares é encontrar funções de ondas eletrônicas aproximadas para uma molécula atribuindo a cada elétron uma função que, em geral, se estende por toda a molécula.

Dá-se a cada μ -ésimo elétron uma função dependente das coordenadas espaciais chamada de orbital molecular (MO),

$$\varphi_i^\mu = \varphi_i(x^\mu, y^\mu, z^\mu) \quad (2.16)$$

ou, para um tratamento mais refinado, uma função de onda dependente das coordenadas espaciais e de spins, o spin-orbital molecular,

$$\psi_i(q^\mu) = \varphi_i^\mu(x^\mu, y^\mu, z^\mu)\xi(S^\mu) = \varphi_i(\mu)\xi(\mu) = \varphi_i^\mu \xi^\mu \quad (2.17)$$

onde

$$\xi(S^\mu) = \begin{Bmatrix} \alpha(\mu) & \uparrow \\ \beta(\mu) & \downarrow \end{Bmatrix} \quad (2.18)$$

Para uma estrutura de camada fechada, os spins-orbitais moleculares são dados por $\psi_{2i-1} = \psi_i\alpha$ e $\psi_{2i} = \psi_i\beta$, onde os orbitais moleculares podem ser agrupados em conjuntos completos degenerados.

A função total do sistema de N-elétrons é construída como um produto anti-simétrico dos spin-orbitais, na forma de um determinante de Slater, conhecida também como função de onda determinantal. Ela satisfaz ao princípio de exclusão de Pauli e os spins-orbitais que a formam são linearmente independentes.

$$\Psi = (N!)^{-1/2} \begin{bmatrix} \psi_1^{(1)} & \psi_2^{(1)} & \dots & \psi_N^{(1)} \\ \psi_1^{(2)} & \psi_2^{(2)} & \dots & \psi_N^{(2)} \\ \text{M} & \text{M} & \text{O} & \text{M} \\ \psi_1^{(N)} & \psi_2^{(N)} & \Lambda & \psi_N^{(N)} \end{bmatrix} \quad (2.19)$$

O hamiltoniano total para a parte eletrônica da função de onda é dado por:

$$\hat{H} = \sum_{\mu} H^{\mu} + \frac{1}{2} e^2 \sum_{\mu \neq \nu} \frac{1}{r^{\mu\nu}} \quad (2.20)$$

onde H^{μ} é o operador hamiltoniano para o μ -ésimo elétron movendo-se no campo do núcleo e $r^{\mu\nu}$ é a distância entre o μ -ésimo e o ν -ésimo elétron.

2.6 Método Hartree-Fock-Roothaan

O método Hartree-Fock busca uma solução aproximada para o estado fundamental de uma molécula considerando apenas um determinante de Slater como função de onda. Os spin-orbitais usados para compor a função são escolhidos usando o método variacional. Para um sistema de camadas fechadas, considerando-se apenas a parte eletrônica, resolve-se a equação de autovalor para encontrar a energia do sistema:

$$E = 2 \sum_i H_i + \sum_{ij} (2J_{ij} - K_{ij}) \quad (2.21)$$

onde J_{ij} , K_{ij} são as integrais de Coulomb e de troca, e H_i são as energias dos orbitais no campo do núcleo, respectivamente, que são definidos por,

$$H_i = \int \varphi_i^* H \varphi_i d\tau \quad (2.22)$$

$$J_{ij} = \int \varphi_i^* \varphi_j^* \varphi_i^{\mu} \varphi_j^{\nu} \frac{e^2}{r^{\mu\nu}} d\tau^{\mu\nu} \quad (2.23)$$

$$K_{ij} = \int \varphi_i^* \varphi_j^* \varphi_j^{\mu} \varphi_i^{\nu} \frac{e^2}{r^{\mu\nu}} d\tau^{\mu\nu} \quad (2.24)$$

Definem-se os operadores de Coulomb e de troca J_j e K_j , respectivamente,

$$J_i^{\mu} \varphi^{\mu} = e^2 \left(\int \frac{\varphi_i^* \varphi_i^{\nu}}{r^{\mu\nu}} d\tau^{\nu} \right) \varphi^{\mu} \quad \text{e} \quad K_{ij} \varphi^{\mu} = e^2 \left(\int \frac{\varphi_i^* \varphi^{\nu}}{r^{\mu\nu}} d\tau \right) \varphi_i^{\mu} \quad (2.25)$$

Quando cada orbital molecular φ_i é modificado por uma quantidade infinitesimal $\partial\varphi_i$, a variação da energia será:

$$\partial E = 2 \sum_i \partial H_i + \sum_{ij} (2\partial J_{ij} - \partial K_{ij}) \quad (2.26)$$

Aplica-se o método dos multiplicadores de Lagrange para encontrar as condições em que $\partial E = 0$, para a escolha dos $\partial\varphi_i$ compatíveis, sujeitos à condição de ortogonalidade. Encontra-se que estas condições são:

$$\left\{ H_i + \sum_j (2J_j - K_j) \right\} \varphi_i = \sum_j \varphi_j \varepsilon_{ji} \quad (2.27)$$

e o seu conjugado complexo.

Quando subtraímos esta equação do seu conjugado complexo, obtemos:

$$\sum_j \varphi_j (\varepsilon_{ji} - \varepsilon_{ij}^*) = 0 \quad (2.28)$$

e isto implica que $\varepsilon_{ji} = \varepsilon_{ij}^*$, e a matriz formada pelos elementos ε_{ij} , $\varepsilon = \varepsilon_{ij}$, é hermitiana.

Define-se o operador de Fock $\hat{F}$ e o operador de interação eletrônica total $\hat{G}$, respectivamente, por:

$$\hat{F} = \hat{H} + \hat{G} \quad \text{e} \quad \hat{G} = \sum_i (2J_i - K_i) \quad (2.29)$$

O operador $\hat{F}$ representa um campo de $2n-1$ elétrons devido ao fato que os operadores J_i e K_i são iguais quando operam sobre φ_i .

Encontra-se, assim, que os melhores orbitais moleculares satisfazem às equações:

$$\hat{F}\varphi_i = \sum_j \varphi_j \varepsilon_{ji} \quad (2.30)$$

que em notação matricial é $\mathbf{F}\varphi = \varphi\boldsymbol{\varepsilon}$. Quando submetida a uma transformação unitária, resulta $\mathbf{F}'\varphi' = \varphi'\boldsymbol{\varepsilon}'$, onde a matriz $\boldsymbol{\varepsilon}' = \mathbf{U}^t \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{U}$ é uma matriz diagonal com elementos reais.

Podemos concluir que os orbitais moleculares satisfazem à equação canônica Hartree-Fock $\mathbf{F}\varphi = \varphi\boldsymbol{\varepsilon}$.

A maioria dos cálculos de estrutura eletrônica é baseada na teoria de orbitais moleculares em que os φ_i são escritos como uma combinação linear de orbitais atômicos dados *a priori* (LCAO-MO). Temos então,

$$\varphi_i = \sum_p C_{pi} \chi_p \quad (2.31)$$

onde χ_p é o p-ésimo orbital atômico, normalizado, e φ_i o i-ésimo orbital molecular. Em notação matricial temos:

$$\bar{\chi} = (\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_n) \quad (2.32)$$

$$C_i = \begin{pmatrix} C_{1i} \\ C_{2i} \\ M \\ C_{mi} \end{pmatrix} \quad C = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & \Lambda & C_{1n} \\ C_{21} & C_{22} & \Lambda & C_{2n} \\ M & M & M & M \\ C_{m1} & C_{m2} & \Lambda & C_{mn} \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

onde n é o número de orbitais atômicos.

Para a construção de LCAO-MO para o estado fundamental é preciso encontrar um conjunto de coeficientes C_{pi} em que a energia eletrônica alcance um mínimo.

Seja $\hat{M}$ o operador de uma partícula e $M_{pq} = \int \chi_p^* \hat{M} \chi_q d\tau$, com a matriz quadrada dada por:

$$M = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} & \Lambda & M_{1n} \\ M_{21} & M_{22} & \Lambda & M_{2n} \\ M & M & O & M \\ M_{m1} & M_{m2} & \Lambda & M_{mn} \end{bmatrix} \quad (2.34)$$

em notação matricial o operador de um elétron é:

$$\int \varphi_i M \varphi_j d\tau = c_i^* M c_j \quad (2.35)$$

como os orbitais moleculares formam um conjunto ortonormal, temos:

$$\int \varphi_i \varphi_j d\tau = c_i^* S c_j = \delta_{ij} \quad (2.36)$$

onde **S** é a matriz de superposição ou de *overlap*, cujos elementos são dados por:

$$S_{pq} = \int \chi_p^* \chi_q d\tau \quad (2.37)$$

O procedimento acima aplica-se para H_i , J_{ij} e K_{ij} , obtendo-se:

$$H_i = c_i^* H c_i, \quad J_{ij} = c_i^t J_j c_i \quad \text{e} \quad K_{ij} = c_i^* K_j c_i \quad (2.38)$$

Para determinarmos os melhores orbitais moleculares devemos considerar um novo problema variacional que objetiva minimizar a energia e obter uma função de onda mais aproximada possível daquela do estado fundamental, conforme o teorema de Eckart.

$$\partial E = 2 \sum_i (\partial c_i^*) F c_i + 2 \sum_i (\partial c_i^t) \bar{F} c_i \quad (2.39)$$

onde **F** é o operador de Fock na base matricial dos orbitais moleculares, que é conhecido como operador de Hartree-Fock-Roothaan.

Aplicando o método variacional à condição de ortonormalidade, temos,

$$(\partial c_i^*) S c_j + c_i^* S (\partial c_j) = 0 \quad (2.40)$$

Utilizando a técnica dos multiplicadores de Lagrange, a condição $\partial E = 0$ é satisfeita quando:

$$FC_i = \sum_j SC_j \varepsilon_{ij} \quad (2.41)$$

Esta equação pode ser escrita na forma mais geral, a equação de Hartree-Fock-Roothaan: $\mathbf{FC} = \mathbf{SC}\boldsymbol{\varepsilon}$, que pode também ser escrita como $(\mathbf{F} - \boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{S})\mathbf{C} = 0$.

Assim, temos um conjunto de equações onde os autovalores são as raízes da equação secular $\det|\mathbf{F}_{qp} - \varepsilon_i \mathbf{S}_{qp}| = 0$.

2.7 Funções de Base

Outra aproximação necessária consiste em expressar os orbitais moleculares como combinações lineares de um conjunto pré-definido de funções conhecidas de um elétron como funções de base. Estas funções de bases são usualmente centradas no núcleo atômico e assim têm alguma semelhança com orbitais atômicos. O tratamento matemático de fato é mais geral que este, e qualquer conjunto de funções apropriadamente definidas pode ser usado.

Um orbital molecular individual é definido como:

$$\varphi_i = \sum_p C_{pi} \chi_p \quad (2.42)$$

onde o coeficiente C_{pi} são os coeficientes de expansão do orbital molecular. As funções de base χ_p são normalizadas. Assim, χ_p refere-se a um orbital molecular arbitrário.

Os orbitais dos átomos constituintes de uma molécula podem ser usados como funções de base, procedimento que é conhecido como teoria da combinação linear dos orbitais atômicos (LCAO).

Os programas *ab initio* de estrutura eletrônica usam funções de bases do tipo gaussianas, que têm a forma geral:

$$g(\alpha, \mathbf{r}) = c x^n y^m z^l e^{-\alpha r^2} \quad (2.43)$$

onde, r é naturalmente composto de x , y e z , e α é uma constante determinando a extensão radial da função. Em uma função gaussiana, o exponencial $e^{-\alpha r^2}$ é multiplicado por potências de x , y , e z , e por uma constante para normalização, tal que, $\int g^2 d\tau = 1$. Assim, a constante de normalização, c , depende de α , l , m e n .

Exemplificamos abaixo três funções gaussianas representativas de orbitais do tipo s , p_y e d_{xy} , respectivamente:

$$g_s(\alpha, r) = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{3/4} e^{-\alpha r^2} \quad (2.44)$$

$$g_y(\alpha, r) = \left(\frac{128\alpha^5}{\pi^3}\right)^{1/4} y e^{-\alpha r^2} \quad (2.45)$$

$$g_{xy}(\alpha, r) = \left(\frac{2048\alpha^7}{\pi^3}\right)^{1/4} xy e^{-\alpha r^2} \quad (2.46)$$

Combinações lineares de gaussianas primitivas como estas são usadas para formar as gaussianas contraídas, que têm a forma:

$$\chi_p = \sum_{\mu} d_{p\mu} g_{\mu} \quad (2.47)$$

onde o $d_{p\mu}$ são constantes físicas em um dado conjunto de base. As funções contraídas são também normalizadas.

Todas estas construções resultam na expansão seguinte para orbitais moleculares:

$$\varphi_i = \sum_{p=1} C_{pi} \chi_p = \sum_p C_{pi} \left(\sum_{\mu} d_{p\mu} g_{\mu} \right) \quad (2.48)$$

Capítulo 3

Novas interações de quarks com a matéria

Neste capítulo abordaremos basicamente os resultados e discussões acerca do nosso trabalho. Inicialmente trataremos de possíveis interações dos quarks com a matéria e em seguida buscaremos discutir algumas implicações na interpretação destes cálculos. Os resultados são basicamente energias eletrônicas e algumas propriedades químicas de átomos e moléculas interagindo com quarks.



3.1 Interações da matéria atômica com quarks

Considerando a possibilidade de quarks e antiquarks interagirem com a matéria atômica a tabela 3.1 mostra as energias calculadas com o método Hartree-Fock utilizando a base 6-311G para os átomos com carga nuclear $Z \pm 1/3$ e $Z \pm 2/3$, indicados de forma genérica pelos símbolos $A_{\underline{u}}$, A_d , $A_{\underline{d}}$ e A_u .

Tabela 3.1. Energias dos átomos $A_{\pm 1/3}$ e $A_{\pm 2/3}$ eletrônicas em eV.

Z	$A_{-2/3}$	$A_{d-1/3}$	A	$A_{1/3}$	$A_{2/3}$
1	-1,5117	-6,0437	-13,5983	-24,1729	-37,7730
2	-29,5901	-51,1823	-78,6581	-112,0918	-151,4408
3	-111,6712	-153,0176	-200,7976	-255,1353	-315,8236
4	-258,5417	-323,3227	-390,7158	-469,1425	-554,8582
5	-478,9849	-570,2760	-669,5902	-776,8575	-884,8220
6	-778,7797	-899,1340	-1028,1120	-1165,6660	-1311,7470
7	-1169,1610	-1321,5710	-1483,2390	-1654,1270	-1834,2000
8	-1655,8130	-1843,2730	-2040,5120	-2246,4730	-2462,7540
9	-2250,2970	-2474,7770	-2711,2670	-2955,4250	-3211,5110
10	-2962,4350	-3227,3590	-3503,6040	-3791,1290	-4089,8980
11	-3789,3900	-4092,4070	-4407,5280	-4734,5560	-5073,3190
12	-4736,8110	-5079,9760	-5435,7080	-5803,8790	-6184,3600
13	-5804,3030	-6188,7710	-6586,0000	-6996,0730	-7418,9030
14	-6997,7810	-7424,55300	-7864,6640	-8318,0160	-8784,5240
15	-8321,1050	-8791,83600	-9276,2710	-9774,33300	-10285,950
16	-9775,9490	-10291,8700	-10821,7800	-11365,5900	-11923,2200
17	-11364,1100	-11925,1100	-12502,7000	-13092,8200	-13695,0900
18	-13098,8300	-13708,8000	-14334,7900	-14973,4700	-15624,4900
19	-14980,4800	-15637,8200	-16311,0800	-16997,3800	-17697,4700
20	-16989,2200	-17694,6700	-18414,5800	-19148,7200	-19906,0100

Sabemos que para o átomo de H a energia varia com Z^2 . Seguindo esta dependência com a carga nuclear, ajustamos a curva mostrada na fig. 3.1 de acordo com a equação $E = -kZ^a$.

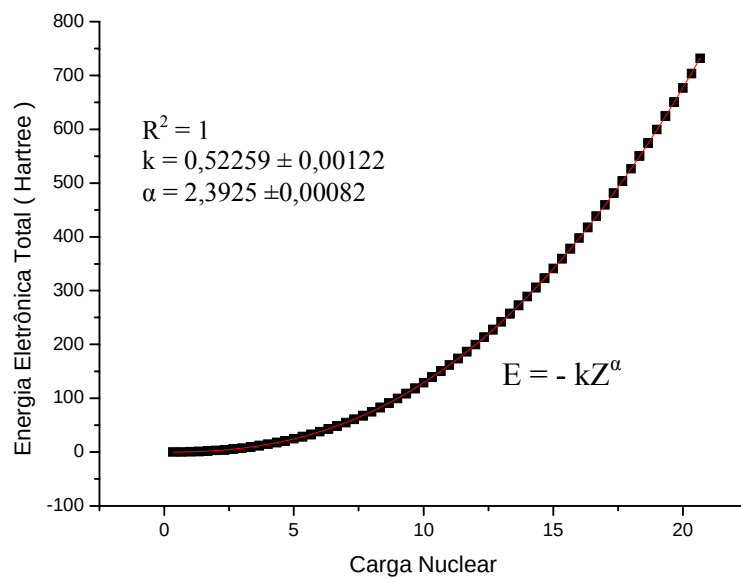


Figura 3.1. Ajuste para as energias eletrônicas dos átomos

Mostramos a seguir o mesmo ajuste para alguns sistemas atômicos em separado.

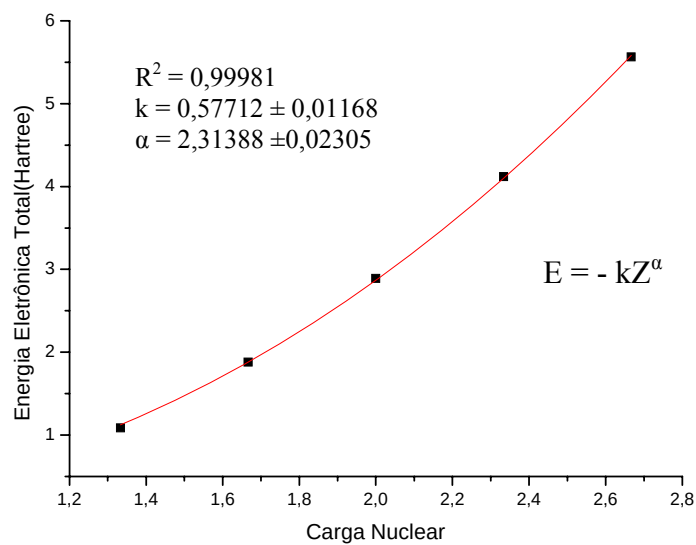


Figura 3.2. Sistemas Heq, He e Heq

Como podemos observar, a curva é bem comportada para o hélio.

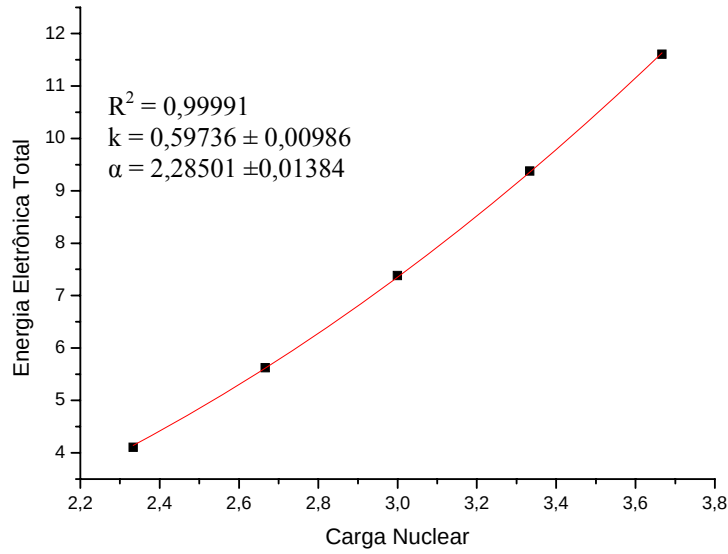


Figura 3.3. Sistemas Liq, Li e Liq

Observamos que para todos os átomos tratados, o comportamento é bastante semelhante. Na próxima seção usaremos este resultado para o estudo da interação de quarks e antiquarks com átomos.

3.2 Energias de interação entre átomos com o par quark-antiquark

No vácuo, o estado condensado de quarks e glúons pode ser representado pelas equações:

$$glúon \rightarrow q + \bar{q} \quad (3.1)$$

$$q + \bar{q} \rightarrow glúon \quad (3.2)$$

Considerando agora o processo acima descrito acontecendo na presença de matéria atômica, admitamos as interações do tipo:

$$A + A + q + \bar{q} \rightarrow Aq + A\bar{q} + \Delta E \quad (3.5)$$

A partir dos resultados da Tabela 3.1 podemos calcular os valores de ΔE para diferentes sistemas atômicos. A tabela 3.2 apresenta esses resultados.

Tabela 3.2. Energias das interações quark-antiquark com átomos (eV)

Z_A	$\Delta E, q_1 = u, q_2 = \bar{u}$	$\Delta E, q_1 = d, q_2 = \bar{d}$
1	-12,088	-3,020
2	-23,715	-5,958
3	-25,800	-6,558
4	-31,968	-11,034
5	-24,626	-7,953
6	-34,302	-8,576
7	-36,882	-9,220
8	-37,543	-8,722
9	-39,275	-7,668
10	-45,124	-11,279
11	-47,654	-11,908
12	-49,755	-12,441
13	-51,206	-12,844
14	-52,977	-13,241
15	-54,510	-13,627
16	-55,612	-13,901
17	-53,804	-12,533
18	-53,759	-12,704
19	-55,790	-13,031
20	-66,067	-14,230

Como a dependência da energia com a carga nuclear é não linear ($E = -kZ^\alpha$), a interação quark-antiquark com a matéria atômica é um processo exotérmico, conforme pode ser observado na Tabela 3.2. Assim, o par quark-antiquark é estabilizado na presença da matéria atômica.

A Tabela 3.2 também mostra que a estabilização do par é tanto maior quanto maior é a carga nuclear. Esse resultado está de acordo com Rújula *et al.*⁶ que, a partir de cálculos de eletrodinâmica quântica, encontraram uma preferência dos quarks livres para se ligarem a núcleos mais pesados.

3.3 Espectroscopia eletrônica para detecção de quarks livres

Em princípio poderíamos detectar pelas vias espectroscópicas a existência de quarks livres ligados a núcleos atômicos.

Com a modificação da carga nuclear toda a eletrosfera irá perceber isso e as transições eletrônicas características serão também modificadas. Por exemplo, a conhecida emissão amarela do sódio seria violeta caso um quark $+2/3$ estivesse ligado ao núcleo. A tabela 3.3 mostra transições $P \rightarrow S$ para Li, Na, Be, Mg e Ca quando quarks $\pm 1/3$ e $\pm 2/3$ estão ligados aos núcleos destes átomos.

Para estes cálculos utilizamos o método CI, acrescentando e modificando funções difusas e polarizadas na base 6-311G para melhorar os resultados nos sistemas ordinários e quarkônicos. Podemos notar que a construção e modificação das funções de base²³ permitiram um cálculo exato no caso dos átomos neutros.

No caso do Na *neutro* reproduzimos exatamente a primeira linha do dubleto D no valor da 5896. Isso indica que nossos resultados são bastante precisos para nortear uma investigação espectroscópica. Os valores experimentais para o Li, Be, Mg, Na e Ca são respectivamente: 6708 Å, 2349 Å, 2852 Å, 5896 Å e 4226 Å.

Tabela 3.3. Transições características de alguns sistemas atômicos.

Z	Transição (Å)
Liu	3583
Lid	4713
Li	6708
Lid	11173
Liu	28456
Beu	1837
Bed	1967
Be	2349
Bed	3242
Beu	6467
Nau	3453

Nad	4411
Na	5896
Nad	8297
Nau	12539
Mgu	2130
Mgd	2538
Mg	2852
Mgd	3402
Mgu	4245
Cau	4664
Cad	3395
Ca	4226
Cad	5559
Cau	7708

Esses resultados servem como guia para uma possível detecção espectroscópica de quarks livres. Notamos também que os sistemas Nau e Mgd possuem transições bastante próximas, uma diferença de aproximadamente 50 Å.

3.4 Sistemas Exóticos

Para os resultados apresentados a seguir, as massas das partículas têm uma importância fundamental. Assim trazemos na tabela 3.4, algumas dessas massas utilizadas nos cálculos.

Tabela 3.5 Massas dos léptons e dos quarks

Partícula	e (elétron)	μ (múon)	τ (táu)	u	d	s	c	b	t
Massa(Mev/c ²)	0,5	105,7	1777,0	1,5 a 3,0	3 a 7	95	1250	4200	1742000

A tabela 3.5 traz os raios calculados pelo modelo de Bohr para alguns sistemas exóticos. Indicamos os sistemas ligados pela combinação da primeira linha (sempre um lépton) com a primeira coluna (sempre com um hadron ou um quark).

Tabela 3.5 Raio (Å) dos sistemas exóticos de dois corpos

	e (elétron)	μ (múon)	τ (táu)
π^+	0,531115	0,004497	0,0020896
p	0,529465	0,002853	0,0004404
Σ^+	0,529405	0,002787	0,0003795
D^+	0,529322	0,002704	0,0002968
u	0,928970	0,139043	0,1354330
c	0,794078	0,004151	0,0005403
t	0,793768	0,003841	0,0002306
d	1,722736	0,142882	0,1356610
s	1,595644	0,015790	0,0085510
b	1,587720	0,007866	0,0006458

Podemos observar, como esperado, a diminuição do raio em função da massa do lépton. É interessante notar que alguns sistemas apresentam dimensões fermiônicas, podendo ser considerado como formando um núcleo de um sistema atômico exótico.

3.5 Molécula de Hq_2

Apresentamos, a seguir, os resultados de cálculos para “moléculas de hidrogênio” formadas por átomos do tipo Hq , H e Hq . A tabela 3.6 mostra os resultados obtidos pelo método Hartree-Fock com a base 6-311++G**.

Tabela 3.6. Energias e distâncias de ligação para moléculas hipotéticas de hidrogênio com cargas nucleares modificadas.

Sistema	Energia (au)	Distância (Å)
H _u —H _u	-0,0375	1,4442
H _u —H _d	-0,2554	1,0999
H _d —H _d	-0,4762	0,9071
H _u —H	-0,6185	0,9137
H _d —H	-0,8248	0,8019
H—H	-1,1325	0,7354*
H _u —H _d	-1,1623	0,8375
H _d —H _d	-1,3248	0,7565
H _d —H	-1,5662	0,7042
H _u —H _u	-1,8962	0,8462
H _d —H _d	-1,9114	0,6777
H _u —H _d	-1,9924	0,7631
H _u —H	-2,1470	0,7083
H _u —H _d	-2,3847	0,6787
H _u —H _u	-2,7313	0,6737

*O valor experimental é 0,7461 Å.

O sistema H_u-H_u está fracamente ligado e a distância de ligação é muito grande enquanto no outro extremo, H_u-H_u, ocorre o oposto.

A Fig. 3.4 mostra as energias comparadas dos sistemas H_{q1}-H_{q2}.

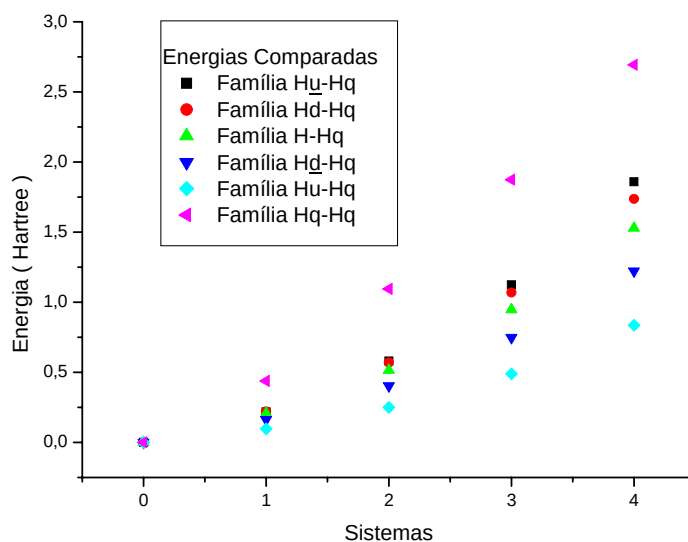


Figura 3.4. Energias totais comparadas das moléculas Hq₁-Hq₂

Estes cálculos permitem avaliar como varia a distância de ligação e a energia total destes sistemas moleculares formados por “átomos quarkônicos”, as “moléculas átomo-quarkônicas”.

Para os sistemas H-Hq, fizemos o cálculo da frequência de estiramento da ligação a fim de estudar as mudanças proporcionadas pela presença de quarks livres. O valor experimental para a frequência do H₂ é 4160 cm⁻¹ enquanto nosso valor calculado foi 3996 cm⁻¹, um erro menor que 5%, o que nos dá uma boa concordância com o experimental. Os valores calculados dessa frequência para os sistemas quarkônicos podem indicar novas vias de detecção experimental.

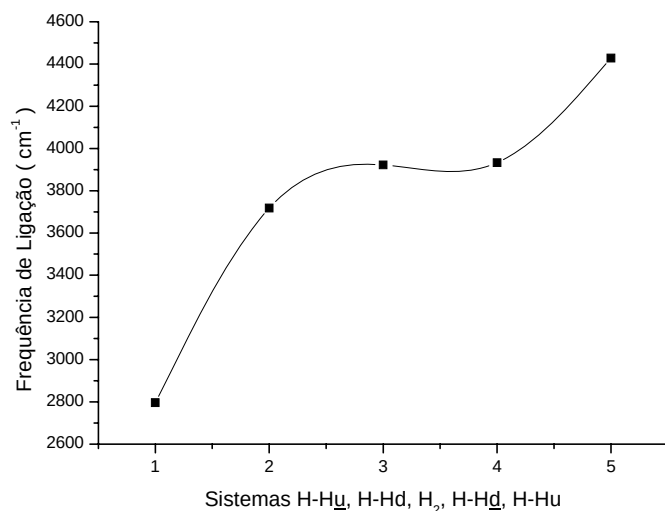


Figura 3.5. Frequência de ligação para as moléculas H-Hq

A tabela 3.7 traz distâncias de ligação calculadas para outras moléculas com um dos átomos quarkônicos.

Tabela 3.7. Energias e distâncias de ligação para moléculas formadas por átomos com carga nuclear fracionária.

Sistema	Energia (au)	Distância (Å)
O—O _u	-135.9929	1.222
O—O _d	-142.8379	1.203
O—O	-150.0473	1.190
O—O _d	-157.6434	1.181
O—O _u	-165.6135	1.182
Cl—H _u	-459.8319	1.39
Cl—H _d	-460.0010	1.32
Cl—H	-460.2600	1.27
Cl—H _d	-460.6442	1.26
Cl—H _u	-461.1888	1.30
Br—H _u	-2572.6854	1.541
Br—H _d	-2572.8475	1.462
Br—H	-2573.1045	1.414
Br—H _d	-2573.4955	1.406
Br—H _u	-2574.0582	1.460

Os valores experimentais das distâncias de ligação O_2 , H-Cl e H-Br são, respectivamente: 1,208 Å, 1,27 Å e 1,410 Å.

3.6 Molécula de Hq_2O

Realizamos um estudo de moléculas de água com “hidrogênios” do tipo Hq, H e Hq e comparamos as energias, distâncias de ligação e ângulos de ligação, em função da alteração da carga nuclear. A tabela 3.8, a seguir, traz estes resultados.

Tabela 3.8. Energias (Hartree), ângulos e distâncias(Å) de ligação para “moléculas” de água.

Sistema	Energia	Ângulo Hq—O—Hq	Distância Hq—O	Distância O—Hq
Hd—O—Hd	-75,4375	109,02	0,974	0,974
H $\underline{u}$ —O—H	-75,5598	109,29	1,032	0,941
Hd—O—H	-75,7677	107,71	0,977	0,939
H—O—H	-76,0535	106,22*	0,941*	0,941*
H $\underline{u}$ —O—H $\underline{d}$	-76,0430	107,60	1,046	0,932
H $\underline{d}$ —O—Hd	-76,2069	105,87	0,987	0,929
H $\underline{d}$ —O—H	-76,4440	104,35	0,929	0,948
H $\underline{d}$ —O—H $\underline{d}$	-76,7819	102,50	0,933	0,933
Hu—O—H $\underline{u}$	-76,6710	104,11	1,075	0,971
Hu—O—Hd	-76,7871	102,72	1,006	0,963
Hu—O—H	-76,9718	101,35	0,959	0,961
Hu—O—H $\underline{d}$	-77,2537	99,69	0,942	0,959
Hu—O—Hu	-77,6666	97,26	0,965	0,965

*Os valores experimentais para o ângulo de ligação e distância são, respectivamente, 104,45° e 0,958 Å.

Observamos que para quarks d o ângulo aumenta enquanto diminui para os quarks u. Em relação às distancias não há variações significativas, ficando todas em torno de 1 Å.

Capítulo 4

Conclusões

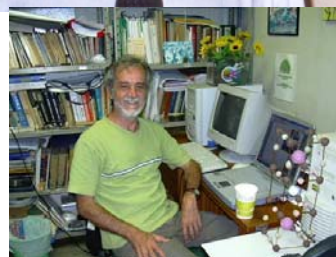
Podemos concluir dentre outras coisas que:

- Sistemas com quarks não confinados podem ser calculados por métodos químicos quânticos, indicando vias teóricas para possíveis detecções.
- A matéria atômica pode representar um meio



estabilizante de quarks em relação aos glúons.

- Podemos estudar propriedades físico-químicas de variados sistemas moleculares quarkônicos.



Temos como perspectivas deste trabalho:

- Como se dariam outras interações entre quarks livres e sistemas atômico-moleculares.
- Como se portariam os demais quarks e léptons em situações semelhantes previstas neste trabalho.
- Realizar estudos de sistemas com quarks na eletrosfera.
- Calcular outras propriedades de moléculas átomo-quarkônicas como o momento de dipolo elétrico, transições eletrônicas e propriedades termodinâmicas como ΔS^0 , ΔH^0 e ΔG^0 .



REFERÊNCIAS

1. Stoney, G. J.; *Philosophical Magazine*; série 5, **38**, 418, 1894.
2. Thomson, J.J., Cavendish, F. R. S.; *Philosophical Magazine*; série 6, **7**(39), 237, 1904.
3. Pavão, A.C.; *Química Nova*. **8**, 80(1985).
4. Abdalla, M. C. B. ; *O charme das partículas elementares*, 2006, Editora da Unesp.
5. Netto, G.A.; Tese de mestrado. Departamento de física UFPE, setembro de 1988.
6. De Rújula, A., Giles, R.C., Jaffe, R.L.; *Phys. Rev. D* **17**, 285(1978).
7. Batra, P., Dobrescu, B.A., Spivak, D.; *J. Math. Phys.* **47**(8), 082301(2006).
8. Perl, M.L., Loomba, D.; *Mod. Phys. Let.* **35**, 2595(2004).
9. White, H.E.; *Introduction to Atomic and Nuclear Physics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1988.
10. Rindani, S.D.; hep-ph/0210054v1-2002.
11. Mori, M., Oyama, Y., Suzuki, A., Takahashi, K., Yamada, M., Miyano, K., Miyata, H., Takei, H., Hirata, K.S., Kajita, T., Kihara, K., Nakahata, M., Nakamura, K., Ohara, S., Sato, N., Suzuki, Y., Totsuka, Y., Yaginuma, Y., Koshihara, M., Suda, T., Tajima, T., Fukuda, Y., Nagashima, Y., Takita, M., Kaneyuki, K., Tanimori, T., Beier, E.W., Frank, E.D., Frati, W., Kim, S.B., Mann, A.K., Newcomer, F.M., Vanberg, R., Zhang, W.; *Phys. Rev. D* **43**(9), 2843(1991).
12. Pavão, A.C., Craw, J.S., Nascimento, M.A.C.; *Int. J. Quan. Chem.*, **48**, 219(1993).
13. Lackner, K.S., Zweig, G.; *Lettere Al Nuovo Cimento* **33** (3), 65(1982).
14. Schaad L.J., Hess, B.A., Wikswo J.P., Fairbank W.M.; *Phys. Rev. A* **23** (4), 1600(1981).
15. Cacelli, I., Rizzo, A.; *Mol. Phys.* **86**, 397(1995).
16. Shaw, G.L., Tien, J.; *Phys. Rev. D* **47**, 5075(1993).
17. Jorgensen, C.K.; *Nature* **292** (5818), 41(1981).
18. Puy, D., Signore, M; *New Astronomy Reviews* **46**, 709(2002).
19. Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, H. B., Scuseria, G. E., Robb, M. A., Cheeseman, J. R., Zakrzewski, V. G., Montgomery, J. A. J., Stratmann, R. E., Burant, J. C., Dapprich, S., Millam, J. M., Daniels, A. D., Kudin, K. N., Strain, M. C., Farkas, O., Tomasi, J., Barone, V., Cossi, M., Cammi, R., Mennucci, B., Pomelli, C., Adamo, C., Clifford, S., Ochterski, J., Petersson, G. A., Ayala, P. Y., Cui, Q., Morokuma, K., Malick, D. K., Rabuck, A. D., Raghavachari, K., Foresman, J. B., Cioslowski, J., Ortiz, J. V., Baboul, A. G., Stefanov, B. B., Liu, G., Liashenko, A., Piskorz, P., Komaromi, I.

- , Gomperts, R. , Martin, R. L., Fox, D. J., Keith, T., Al-Laham, M. A., Peng, C. Y., Nanayakkara, A., Gonzalez, C., Challacombe, M., Gill, P. M. W., Johnson, B., Chen, W., Wong, M. W., Andres, J. L., Gonzalez, C., Head-Gordon, M., Replogle, E. S., Pople, J. A.; Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 1998.
20. Pavão, A.C., Ferreira J.V.; *Int. J. Quant. Chem.* **106** (13), 2578(2006).
21. Roothaan, C.C.J.; *Rev. Mod. Phys.* **24**, 69(1951).
22. Lanças, F. M., Talamoni, J.; *Química Nova* **10**(1), 11(1987).
23. (a) Custódio, R., Goddard, J.D., Santos, M.G., Morgon, N.H.; *Intern. J. Quantum Chem.* **42**, 411(1992). (b) Clark, T., Chandrasekhar, J., Spitznagel, G. W., Schleyer, P. V. R.; *J. Comp. Chem.* **4**, 294(1983). (c) Frisch, M. J., Pople, J. A., Binkley, J. S.; *J. Chem. Phys.* **80**, 3265(1984).

Anexos

Artigos Publicados

