

Estados eletrônicos de mais baixa energia da molécula BeAs

Tiago Vinícius Alves*¹ (PG), Willian Hermoso¹ (PG), Fernando Rei Ornellas¹ (PQ)

*e-mail: tiagovini@iq.usp.br

¹Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 26077, São Paulo, SP, 05513-970, Brasil

Palavras Chave: MRCI, Arseneto de Berílio, Ab Initio.

Introdução

Nos últimos anos, nosso grupo de pesquisa tem dedicado parte de suas pesquisas na investigação de moléculas diatômicas neutras e iônicas contendo berílio. Nesses estudos, o principal objetivo tem sido a caracterização acurada de propriedades espectroscópicas dos estados eletrônicos que se correlacionam com os canais de dissociação de mais baixa energia [1-3].

Neste estudo, em particular, realizamos uma ampla investigação dos estados eletrônicos da molécula BeAs, ainda desconhecida experimentalmente, incluindo a descrição das curvas de energia potencial, estados vibracionais, constantes espectroscópicas, funções do momento de dipolo e correções de efeitos de spin-órbita, utilizando o estado-da-arte em termos de métodos de estrutura eletrônica.

Resultados e Discussão

O método de estrutura eletrônica utilizado foi o CASSCF/MRCI com espaço ativo (9,12). O conjunto de bases atômicas do tipo consistentes na correlação com valência polarizada quántupla zeta (cc-pV5Z) para o Be e do tipo aug-cc-pV5Z-PP para o As foram usadas neste trabalho. Os estados eletrônicos se dissociam nos cinco primeiros canais: Be (¹S_g) + As (⁴S_u), Be (¹S_g) + As (²D_u), Be (¹S_g) + As (²P_u), Be (³P_u) + As (⁴S_u), Be (³P_u) + As (²D_u). As contribuições dos efeitos de spin-órbita foram obtidas pela diagonalização de uma matriz dos operadores eletrônicos e de spin-órbita (H_{el} + H_{SO}) na base dos auto-estados (Λ + S) de H_{el}, sendo que o espaço ativo foi reduzido para (9,9) juntamente com o conjunto de bases tripla zeta do mesmo tipo descrita anteriormente.

Tabela 1. Energias de excitação adiabática (em cm⁻¹), distâncias de equilíbrio (em Å), constantes vibracionais (em cm⁻¹) e energias de dissociação (em kcal/mol) para a molécula BeAs.

| | T_e | R_e | ω_e | $\omega_e x_e$ | D_e |
|-------------------------------|----------|-------|------------|----------------|-------|
| X ⁴ Σ ⁻ | 0,0 | 2,187 | 500,8 | 1,508 | 23,87 |
| a ² Π | 932,8 | 2,017 | 674,2 | 5,709 | 51,95 |
| b ² Σ ⁻ | 2 106,9 | 2,174 | 585,8 | 7,742 | 48,48 |
| c ² Δ | 6 801,5 | 2,177 | 527,4 | 0,258 | 34,54 |
| d ² Σ ⁺ | 12 093,3 | 2,148 | 566,1 | 2,543 | 40,92 |

A tabela 1 resume os parâmetros encontrados para o estado fundamental e quatro estados eletronicamente excitados de mais baixa energia da molécula BeAs.

Na figura 1, podemos observar as curvas de energia potencial dos estados relativísticos (Ω) gerados com a mistura dos estados X ⁴Σ⁻, a ²Π, b ²Σ⁻ e c ²Δ.

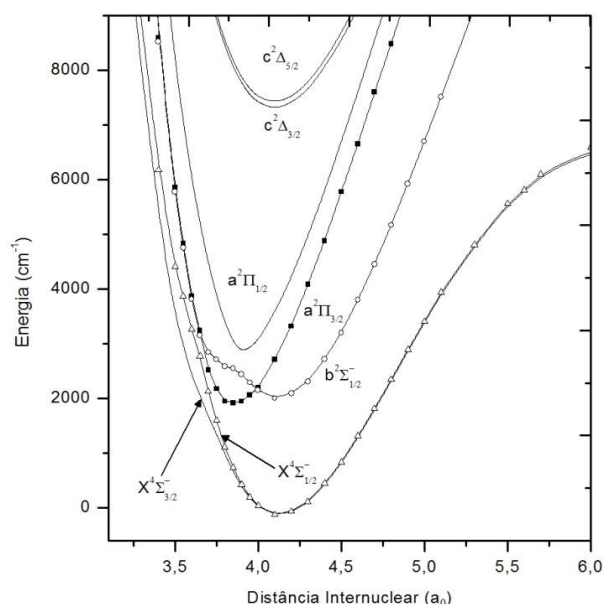


Figura 1. Curvas de energia potencial do estado fundamental e estados relativísticos (Ω) dubletos de mais baixa energia da molécula BeAs.

Conclusões

Este estudo representa a primeira descrição dos estados eletrônicos de mais baixa energia para a molécula BeAs. Nossas expectativas são que o conjunto de dados apresentados neste estudo sirva de guia e motivação para futuras caracterizações experimentais dessa espécie.

Agradecimentos

À FAPESP (T.V.A, W.H e F.R.O) e ao CNPq (F.R.O).

¹ Ornellas, F. R., Roberto-Neto, O., Borin, A. C., Machado, F. B. C., *J. Chem. Phys.* **1991**, *95*, 9086.

² Ornellas, F. R., *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **2009**, *42*, 185102.

³ Borin, A. C., Ornellas, F. R., *Mol. Phys.* **1994**, *184*, 59.