

## Estados eletrônicos de mais baixa energia da molécula BeAs

Tiago Vinícius Alves\*<sup>1</sup> (PG), Willian Hermoso<sup>1</sup> (PG), Fernando Rei Ornellas<sup>1</sup> (PQ)

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

<sup>1</sup>Departamento 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

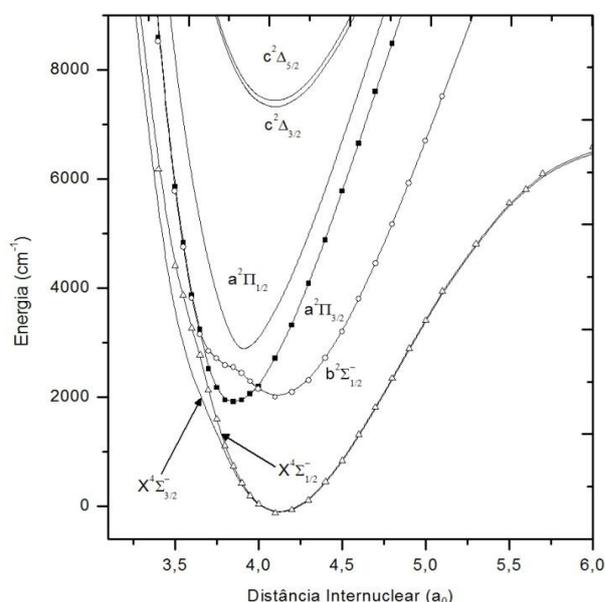
O método de estrutura eletrônica utilizado foi o CASSCF/MRCI com espaço ativo (9,12). O conjunto de bases atômicas do tipo consistentes na correlação com valência polarizada quántupla zeta (cc-pV5Z) para o Be e do tipo aug-cc-pV5Z-PP para o As foram usadas neste trabalho. Os estados eletrônicos se dissociam nos cinco primeiros canais: Be (<sup>1</sup>S<sub>g</sub>) + As (<sup>4</sup>S<sub>u</sub>), Be (<sup>1</sup>S<sub>g</sub>) + As (<sup>2</sup>D<sub>u</sub>), Be (<sup>1</sup>S<sub>g</sub>) + As (<sup>2</sup>P<sub>u</sub>), Be (<sup>3</sup>P<sub>u</sub>) + As (<sup>4</sup>S<sub>u</sub>), Be (<sup>3</sup>P<sub>u</sub>) + As (<sup>2</sup>D<sub>u</sub>). As contribuições dos efeitos de spin-órbita foram obtidas pela diagonalização de uma matriz dos operadores eletrônicos e de spin-órbita (H<sub>el</sub> + H<sub>SO</sub>) na base dos auto-estados (Λ + S) de H<sub>el</sub>, 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<sup>-1</sup>), distâncias de equilíbrio (em Å), constantes vibracionais (em cm<sup>-1</sup>) e energias de dissociação (em kcal/mol) para a molécula BeAs.

	$T_e$	$R_e$	$\omega_e$	$\omega_e x_e$	$D_e$
X <sup>4</sup> Σ <sup>-</sup>	0,0	2,187	500,8	1,508	23,87
a <sup>2</sup> Π	932,8	2,017	674,2	5,709	51,95
b <sup>2</sup> Σ <sup>-</sup>	2 106,9	2,174	585,8	7,742	48,48
c <sup>2</sup> Δ	6 801,5	2,177	527,4	0,258	34,54
d <sup>2</sup> Σ <sup>+</sup>	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 <sup>4</sup>Σ<sup>-</sup>, a <sup>2</sup>Π, b <sup>2</sup>Σ<sup>-</sup> e c <sup>2</sup>Δ.



**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).

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

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

<sup>3</sup> Borin, A. C., Ornellas, F. R., *Mol. Phys.* **1994**, *184*, 59.