

Aspecto vibracional da molécula de HH^+ confinada

André Luiz Fassone Canova^{1,*} (PG), Aguinaldo Robinson de Souza² (PQ)

1) Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia de Materiais – POSMAT

2) Departamento de Química – Faculdade de Ciências – UNESP

Av. Eng. Luiz Edmundo Carrijo Coube, 14-01

17033-360 Bauru – SP

Palavras Chave: Hartree-Fock, Efeitos de blindagem, Moléculas Confinadas.

Introdução

O método de Hartree-Fock¹ é um método *AB INITIO* de resolução da equação de Schrödinger, foi desenvolvido na década de 30 por Douglas Hartree e contribuições substanciais de Vladimir Fock.

O estudo de moléculas confinadas data do início do desenvolvimento da Física Quântica e, um desses estudos, é didaticamente utilizado em todos os cursos de física e de química quântica, que é o estudo da partícula na caixa². Um dos potenciais utilizados para simular os efeitos de confinamento é o Potencial de Yukawa³, amplamente difundido no estudo de gases ionizados e plasma. As propriedades atômicas e/ou moleculares são alteradas em função do potencial de confinamento.

Nesse trabalho utilizamos o Potencial de Yukawa, com diversos fatores de blindagem, para simular o confinamento da molécula HH^+ e determinamos tanto a curva de energia potencial quanto o modo de vibração, que pode determinada pela aproximação harmônica², desde que a curva de energia potencial possa ser aproximada por uma equação de 2º grau.

Resultados e Discussão

O método HF nos forneceu a curva de energia potencial para a molécula HH^+ com diversos valores para o fator de blindagem, ver figura 1.

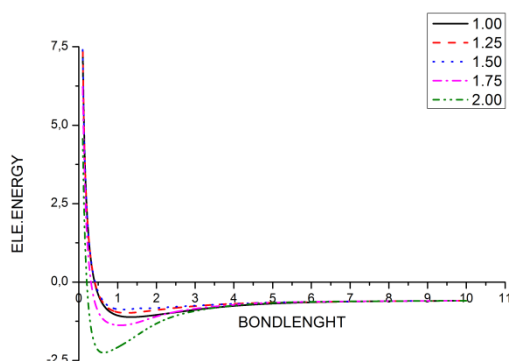


Figura 1. HH^+ STO-3G

Destes dados, destacamos o valor da menor energia encontrada, e a respectiva distância interatômica. Determinamos, também, o ajuste de

curvas polinomial na vizinhança do ponto de mínimo destacado e determinamos a frequência de vibração, ver a tabela 1.

HH^+ STO-3G			
Fator de Blindagem	Energia de Ligação (u.a)	Distância de Ligação (u.a)	Frequência (cm^{-1})
1.00	-1,117506	1,3460	5447.85
1.25	-0,986098	1,2225	6167.14
1.50	-0,840893	1,7015	4830.19
1.75	-1,379014	1,0800	7847.57
2.00	-2,252822	0,6360	16488.83

Tabela 1. Propriedades moleculares em função do fator de blindagem

Conforme o fator de blindagem aumenta a distância de ligação diminui, indicando um aumento nos efeitos do confinamento.

Conforme relatado por Bielinska-Waz e colaboradores⁴ confirmou-se o deslocamento para o azul nas frequências em que o confinamento se fazem mais efetivos.

Conclusões

As frequências de vibração calculadas para a molécula HH^+ estão em concordâncias com dados da literatura e de outros dados experimentais, demonstrando a viabilidade, tanto do método HF quanto do código modificado que foram utilizados nesse trabalho, para o estudo de sistemas confinados.

Agradecimentos

Os autores agradecem às agências de fomento CNPq e FAPESP.

1 Szabo, A., Ostlund, N. S., *Modern Quantum Chemistry, Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*, Dover Publications: New York, 1989.

2 Levine, Ira N., *Quantum Chemistry*. Prentice Hall: New Jersey, 2009.

3 Yukawa, H. *On the Interaction of Elementary Particles*. Proceedings of the Physical-Mathematical Society of Japan, 1935, 17, 48.

4 Bielinska-Waz, D., Dierksen, G.H.F., Klobukowski, M.; *Chem. Phys. Lett.* **2001**, 30, 215.