

# Estudo Teórico dos Parâmetros Espectroscópicos da molécula de HCl.

Vinicius V. Da Cruz(IC)\*, Freddy F. Guimarães(PQ)

\*[viniciuscruz@gmail.com](mailto:viniciuscruz@gmail.com)

Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Campus Samambaia, CEP 74001-790, Goiânia – GO, Brasil

Palavras Chave: Parâmetros espectroscópicos do HCl, Potencial de Morse, DFT, e MRCI.

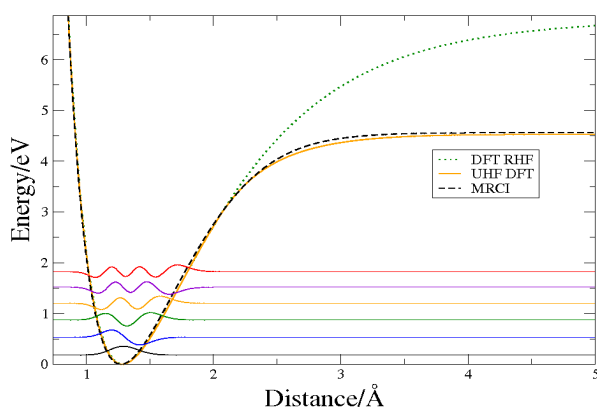
## Introdução

Neste trabalho são construídas curvas de energia potencial para a molécula de HCl. As curvas são obtidas através de diferentes níveis de cálculos de estrutura eletrônica. A análise da qualidade e validação das curvas de potencial é feita através da comparação entre parâmetros espectroscópicos obtidos das curvas de potencial e dados experimentais. Este tipo de análise fornece subsídios para a futura construção de superfícies de potencial que serão usadas em cálculos de espalhamento átomo-molécula (H+HCl, H+ClH e Cl+H<sub>2</sub>).

## Resultados e Discussão

Os cálculos das curvas de potencial para o HCl são realizados com pacote de química quântica GAMESS<sup>1</sup>. Os cálculos computacionais foram feitos principalmente utilizando três métodos: 1) Interação configuração multireferencial (MRCI), 2) Teoria do Funcional de Densidade Restrita (RDFT) e 3) não restrita (UDFT). Nos cálculos DFT foi utilizado o Funcional híbrido X3LYP<sup>2</sup>. Os cálculos MRCI são realizados considerando um espaço ativo completo (CAS) com 6 elétrons ativos em 11 orbitais. O programa eSpec<sup>4</sup> é utilizado para calcular as respectivas auto-energias e autofunções da curva de potencial. As curvas de potencial e as funções de onda são apresentadas na Fig. 1.

A partir dos auto-valores das autofunções da Fig. 1 e considerando a parametrização do poten-



**Figura 1.** Curvas de potencial para HCl na base aug-cc-pVTZ em diferentes níveis de teoria. E as funções de onda para os seis primeiros níveis vibracionais.

cial de Morse calculamos as constantes espectroscópicas do HCl (ver Tab. 1). Os resultados obtidos mostram que nos cálculos restritos, a energia de dissociação é superestimada pois neste caso não é permitida a localização dos elétrons nos átomos isolados<sup>3</sup>. Os cálculos não restritos mostram uma energia de dissociação mais consistente com dados experimentais. Para os cálculos MRCI uma aparente inconsistência entre aumento da base e concordância com os valores experimentais é verificada, porém isso se deve a limitação de um espaço ativo para os elétrons. Onde importantes configurações eletrônicas para a descrição do estado aparentemente foram negligenciadas.

**Tabela 1.** Parâmetros espectroscópicos HCl

	Base	$r_e/\text{Å}$	$\omega_e/\text{cm}^{-1}$	$\omega_e x_e/\text{cm}^{-1}$	$B_e/\text{cm}^{-1}$	$D_0/\text{eV}$
UDFT	aug-cc-pVDZ	1,289	2963,907	46,563	10,344	4,793
	aug-cc-pVTZ	1,285	2932,997	48,328	10,408	4,351
	aug-cc-pVQZ	1,281	2931,658	47,900	10,474	4,370
MRCI	aug-cc-pVDZ	1,285	2988,465	51,913	10,409	4,285
	aug-cc-pVTZ	1,274	3010,365	51,687	10,589	4,378
	aug-cc-pVQZ	1,272	3013,257	51,362	10,623	4,396
	Experimental <sup>5</sup>	1,275	2989,740	52,050	10,591	4,430

## Conclusões

Os resultados mostram que todos os cálculos apresentam bons valores próximos a distância de equilíbrio. Entretanto, o RDFT falha a longas distâncias. Os resultados dos parâmetros espectroscópicos obtidos através das curvas MRCI e UDFT estão coerentes com dados espectroscópicos experimentais. O cálculo UDFT é obtido com um menor custo computacional em comparação com o MRCI.

## Agradecimentos

Ao CNPq pelo apoio financeiro. V.V.C. também agradece ao CNPq por sua bolsa de estudos.

<sup>1</sup> M. W. Schmidt, K. K. Baldrige, J. A. Boatz, S. T. Elbert, M. S. Gordon, J. H. Jensen, S. Koseki, N. Matsunaga, K. A. Nguyen, S. J. Su, T. L. Windus, M. Dupuis, J. A. Montgomery. *J. Comput. Chem.*, 1347-1363 (1993).

<sup>2</sup> X. Xu, W. A. Goddard III, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **2004**, 101, 2673–2677.

<sup>3</sup> F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, 2<sup>nd</sup> Edition (2006)

<sup>4</sup> F.F. Guimarães, V. Kimberg, V. C. Felicíssimo, F. Gel'mukhanov, A. Cesar, and H. Ågren, *Infrared-x-ray pump-probe spectroscopy of NO molecule*, *Physical Review A* 72, 012714-1 – 012714 (2005).

<sup>5</sup> Herzberg, G.F.R.S. *Molecular Spectra And Molecular Structure I Spectra Of Diatomic Molecules*, New York, (1950).