

Estados eletrônicos de mais baixa energia da molécula CI^{2+}

Maiara Oliveira Passos e Tiago Vinicius Alves

Instituto de Química, Universidade Federal da Bahia -Salvador, Bahia, Brasil

Resumo: O estudo das propriedades energéticas, estruturais e espectroscópicas de sistemas diatômicos dicatiónicos têm sido o alvo de inúmeros estudos teóricos e experimentais [1-3]. Dentro deste contexto e, motivados pelas investigações recentes realizadas no nosso grupo de pesquisa [3], realizamos uma ampla exploração dos estados de mais baixa energia que se correlacionam com os dois primeiros canais de dissociação, $C^+(^2P_u) + I^+(^3P_g)$ e $C^+(^2P_u) + I^+(^1D_g)$. Para isto, utilizamos o estado-da-arte em termos de métodos de estrutura eletrônica (SA-CASSCF/MRCI), juntamente com um conjunto de bases consistente na correlação do tipo aug-cc-pV5Z, para o carbono, e aug-cc-pV5Z-PP, para o iodo. Numa primeira exploração, o estado fundamental, $X\ ^2\Sigma^+$, apresenta uma distância internuclear de equilíbrio de 1.8545 Å e uma frequência vibracional harmônica de 885.69 cm^{-1} . O primeiro estado excitado, $1\ ^2\Pi$, encontra-se a 4649.4 cm^{-1} do estado fundamental e com uma distância de equilíbrio significativamente maior ($R_e = 2.1624$ Å). O próximo estado excitado, $1\ ^4\Sigma^+$ ($R_e = 2.0484$ Å e $\omega_e = 516.77\ cm^{-1}$), encontra-se localizado a 16314.12 cm^{-1} .

Tabela 1. Parâmetros espectroscópicos para a molécula CI^{2+} . T_e , ω_e , ω_{ex_e} , ω_{ey_e} , em cm^{-1} , e R_e , em Å

Estados	T_e	R_e	ω_e	ω_{ex_e}	ω_{ey_e}
$X\ ^2\Sigma^+$		1.8545	885.69	6.1228	-0.0400
$1\ ^2\Pi$	4649.4	2.1624	514.77	3.5697	-0.1325
$1\ ^4\Sigma^+$	16314.12	2.0484	516.77	-1.5653	-1.4960

Palavras-chave: Diatômica, MRCI.

Suporte: Esse trabalho teve suporte do CNPq.

Referências:

- [1] M. Tsuji, K. Shinohara, T. Mizuguchi, Y. Nishimura, *Can. J. Phys.* 61 (1983) 251.
- [2] C. Proctor, C. Porter, T. Ast, J. Beynon, *Int. J. Mass Spectrom.* 41 (1982) 251.
- [3] I. A. Lins, A. R. Belinassi, F. R. Ornellas, T. V. Alves, *Chem. Phys. Lett.*, 682, 108 (2017).