

Estudos de Estados Aniônicos da para-Benzoquinona por meio de abordagem colisional e de métodos multiconfiguracionais

Julio C. Ruivo*¹, Fábris Kossoski†² e Márcio T. do N. Varella*³

* Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil

† Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, Brasil

Sinopse. Apresentamos neste trabalho um estudo colisional de elétrons e para-Benzoquinona (p-BQ) a partir de cálculos da seção de choque integral elástica, utilizando o método multicanal de Schwinger com pseudopotenciais. Adicionalmente, realizamos cálculos de estrutura eletrônica com o método multiconfiguracional com perturbação de segunda ordem CASPT2 para o ânion p-BQ⁻, descrevendo seus estados aniônicos em baixas energias. Caracterizamos o seu espectro de ressonâncias de forma, apresentando concordância qualitativa com resultados experimentais da literatura.

Quinonas são conhecidas como receptores de elétrons em processos de transferência de cargas. Sua importância pode ser amplamente encontrada em sistemas biológicos, onde elas são membros presentes nas cadeias de transferência eletrônica. A para-Benzoquinona (p-BQ), Figura 1, é a molécula mais simples da classe das quinonas. Apesar de bem caracterizada eletronicamente, os processos de transmissão eletrônica envolvendo a p-BQ ainda não são igualmente compreendidos. O último estudo colisional da molécula foi realizado na década de 1980 [1], utilizando a técnica de espectroscopia de transmissão eletrônica (ETS), caracterizando três ressonâncias de forma em 0,7 eV, 1,4 eV e 4,4 eV, além de uma ressonância de Feshbach em 2,1 eV.

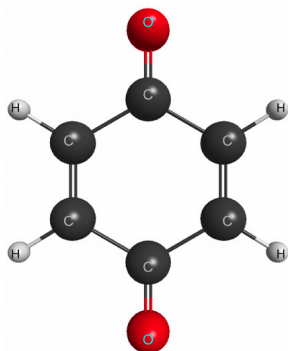


Figure 1. A molécula para-Benzoquinona (p-BQ).

Em relação aos estudos teóricos dos estados excitados da p-BQ⁻, é importante notar que todos eles utilizaram técnicas de estados ligados, não havendo qualquer estudo colisional teórico. O trabalho de Pou-Américo *et al* [2] apresentou um estudo mais completo da estrutura eletrônica do ânion molecular, propondo dois estados na região de 2,5 eV, correspondentes a ressonâncias do tipo *core-excited*,

além de sugerir mais dois estados na faixa de 2,8 eV a 3,6 eV, associados a ressonâncias de caráter misto forma e Feshbach.

Este trabalho apresenta a análise dos estados aniônicos da para-Benzoquinona, caracterizando o espectro de ressonâncias de forma da p-BQ, bem como por estudos de estrutura eletrônica do ânion molecular, compreendendo as configurações componentes de seus estados. Os cálculos de espalhamento foram efetuados utilizando o método multicanal de Schwinger implementado com pseudopotenciais BHS [3]. A investigação das configurações envolvendo os estados aniônicos foi realizada por cálculos CASSCF/CASPT2 baseados no trabalho de Horke *et al* [4], em que foram selecionados 13 elétrons em 10 orbitais moleculares para o espaço ativo (13,10).

Tal estudo possibilita uma melhor compreensão dos resultados experimentais de ETS, assim como oferecem uma interpretação dos estudos teóricos sobre os estados aniônicos da p-BQ, a partir de cálculos de espalhamento.

Referências

- [1] A. Modelli e P. D. Burrow 1984 *J. Phys. Chem.* **88** 3550.
- [2] R. Pou-Américo *et al.* 2000 *J. Am. Chem. Soc.* **122** 6067.
- [3] R. F. da Costa *et al.* 2015 *The Eur. Phys. Journ.* **69** 159.
- [4] D. A. Horke *et al.* 2013 *Nat. Chem.* **5** 711.

¹ E-mail: ruivo@if.usp.br

² E-mail: fabris@if.usp.br

³ E-mail: mvarella@if.usp.br