

Estudo da microsolvatação do íon Li^+ pelo gás raro Kr: Construção da Superfície de Energia Potencial do Sistema Li^+Kr_2

Wanderson S. Jesus^{1*}, Frederico V. Prudente¹, Jorge M. C. Marques² e Francisco B. Pereira³

¹ Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, UFBA, Salvador, BA, Brasil

² Departamento de Química, Universidade de Coimbra, Coimbra, Portugal

³ Instituto Superior de Engenharia de Coimbra, Coimbra, Portugal

Sinopse. Neste trabalho é obtida a superfície de energia potencial (SEP) do sistema Li^+Kr_2 com o intuito de estudar a microsolvatação do íon Li^+ por este gás raro. Esta SEP é construída utilizando a estratégia de expansão de muitos corpos somando os potenciais de dois e três corpos envolvidos. As funções analíticas para esses termos são ajustadas para um conjunto de pontos *ab initio* obtidos com um nível de teoria CCSD(T)/aug-cc-pVQZ, seguida da correção para o erro de sobreposição da base de funções.

A interação entre um íon metálico e átomos de gases raros tem sido submetido a muitos estudos teóricos e experimentais (ver Ref. [1] e referências citadas). Esta interação é devido a força eletrostática envolvendo o íon e o dipolo induzido no gás raro, isto é, depende da polarização do gás raro bem como dos raios e cargas do íon. Espectros de massa obtidos pela técnica de tempo de voo de agregados de íons metálicos com átomos de gás nobre indicam a existência de agregados com números específicos de átomos de gás nobre particularmente estáveis [2]. Especificamente, espectros de massa obtidos por Froudakis e coautores [3] para o agregado Li^+Kr_n indicam estruturas mais estáveis para $n=4, 6, 14, 16$ e 34 . Por outro lado, tem-se verificado que é necessário construir superfícies de energia potencial com os termos do potencial para além das interações de par para obter mínimos globais lineares ou planares que se observam ao nível *ab initio* [4]. O objetivo deste trabalho é investigar a influência das estruturas de aglomerados para a interação entre os gases raros de criptônio (Kr) e o íon lítio (Li^+). Para tal, o primeiro passo é a construção da superfície de energia potencial para o sistema Li^+Kr_2 utilizando a estratégia de expansão de muitos corpos [5,6]. Neste caso, são realizados cálculos *ab initio* de estrutura eletrônica para os sistemas Li^+Kr , Kr_2 e Li^+Kr_2 para diferentes configurações nucleares, para posterior ajuste de potenciais analíticos para dois e três corpos encontrados na literatura. Os cálculos *ab initio* foram realizados no pacote computacional Gamess utilizando o método Coupled Cluster que inclui excitações simples e duplas mais excitações triplas via teoria de perturbação CCSD(T) [7]. Todas as energias eletrônicas obtidas foram corrigidas pelo conjunto de bases de erro de superposição (BSSE) usando o método de counterpoise (CP) proposto por Boys e Bernardi [8]. Uma vez obtida a SEP é então possível fazer a pesquisa de estruturas de baixa energia para os

agregados resultantes da microsolvatação do íon Li^+ utilizando o algoritmo genético (GA) [9,10], por exemplo. Para os agregados mais pequenos será ainda possível confirmar as estruturas dos mínimos globais recorrendo a uma reotimização ao nível MP2.

Agradecimentos: CAPES, CNPq, FAPESB

Referências

- [1] M.K. Beyer, Mass. Spectrom. Rev. 26, 517 (2007).
- [2] C. Lüder, D. Prekas, M. Velegrakis, Laser Chem. 17, 109 (1997).
- [3] G. E. Froudakis, S. C. Farantos, M. Velegrakis, Chem. Phys. 258, 13 (2000).
- [4] M.B.E. Rhouma, F. Calvo, F. Spiegelman, J. Phys. Chem. A 110, 5010 (2006).
- [5] A.M. Maniero, P.H. Acioli, G.M. Silva, R. Gargano, Chem. Phys. Lett., 490, 123-126 (2010).
- [6] F.V. Prudente, J.M.C. Marques, A.M. Maniero, Chem. Phys. Lett. 474, 18-22 (2009).
- [7] M.S. Gordon and M.W. Schmidt, in: *Theory and Applications of Computational Chemistry: the first forty years*, eds. C.E. Dykstra, G. Frenking, K.S. Kim and G.E. Scuseria (Elsevier, Amsterdam, 2005) p. 1167.
- [8] S.F. Boys and F. Bernardi, *Mol. Phys.*, 19 (1970) 553.
- [9] J.M.C. Marques, F.B. Pereira, Chem. Phys. Lett. 485, 211-216 (2010).
- [10] J.L. Llanio-Trujillo, J.M.C. Marques, F.B. Pereira, J. Phys. Chem. A 115, 2130-2138 (2011).