

## A. Ciências Exatas e da Terra - 3. Física - 3. Física Atômica e Molecular

### ESTUDO DO PROCESSO DE INVERSÃO ESPACIAL EM MOLÉCULAS TETRA-ATÔMICAS

Robenilson Ferreira dos Santos <sup>1</sup>

Mirco Ragni <sup>2</sup>

Ana Carla Peixoto Bitencourt <sup>1</sup>

1. Universidade Federal do Recôncavo da Bahia

2. Universidade Federal da Bahia

#### INTRODUÇÃO:

O tratamento quantum-mecânico de processos moleculares constitui uma parte importante na compreensão dos fenômenos atômicos e moleculares básicos. O objetivo deste trabalho é fornecer informações sobre o processo de mudança de quiralidade em moléculas tetra-atômicas protótipos. Este tema é importante para avanços na compreensão da homquiralidade da vida. O trabalho visou a descrição do processo de inversão espacial em sistemas moleculares piramidais, como  $AB_3$ , e as moléculas estudadas foram  $NH_3$ ,  $H_3O^+$ ,  $CH_3^+$ ,  $CH_3^-$ ,  $CH_3^{\square}$ . O modo de inversão de configuração corresponde ao movimento de grande amplitude destas moléculas. Para baixas energias a inversão de configuração conserva a simetria  $C_{3v}$ , pois os modos internos associados aos outros graus de liberdade são mais energéticos.

#### METODOLOGIA:

Os vetores de Radau-Smith foram usados aqui com uma particular parametrização hiperesférica, pois permitem uma boa representação dos modos de vibração das moléculas piramidais. Este sistema de coordenadas apresenta propriedades que simplificam o operador energia cinética  $e$ , portanto, o cálculo da dinâmica dos núcleos. Os cálculos da estrutura molecular, dos modos normais de vibração e das curvas de energia potencial foram realizados usando a Teoria do Funcional de Densidade e o método Coupled Cluster, usando os programas Gamess e Gaussian. Curvas de energia potencial da literatura também foram utilizadas. Os níveis de energia foram calculados resolvendo a equação de Schrödinger do modo de inversão de configuração, usando o algoritmo de hiperquantização.

#### RESULTADOS:

Outro aspecto deste trabalho é o estudo das rotações externas das moléculas  $AB_3$  usando a aproximação do rotor rígido simétrico. Neste caso, foram calculados os valores esperados dos momentos de inércia para  $NH_3$  e as constantes rotacionais para  $NH_3$ ,  $H_3O^+$ ,  $CH_3^+$ ,  $CH_3^-$ ,  $CH_3^{\square}$ .

#### CONCLUSÃO:

Os níveis de energia associados a inversão de configuração espacial e os valores esperados para as constantes rotacionais das moléculas citadas estão em concordância com outros resultados disponíveis na literatura.

Instituição de Fomento: Cnpq

Palavras-chave: Modo de inversão, coordenadas ortogonais e hiperesféricas