

# CÁLCULO DO POTENCIAL DE IONIZAÇÃO VERTICAL DE COMPOSTOS MX (M= LI, NA OU K; X= F AO I) EM FASE GASOSA PELA TEORIA DO FUNCIONAL DE DENSIDADE

Congresso Online Nacional de Química, 3ª edição, de 29/03/2021 a 01/04/2021  
ISBN dos Anais: 978-65-86861-93-8

WANZELER; Heracles Pereira<sup>1</sup>

## RESUMO

**Introdução:** O Potencial de Ionização ( $I$ ), medido por métodos espectroscópicos, não está disponível para todos os compostos conhecidos, assim uma maneira alternativa de obtê-lo é pelo método teórico vertical baseado em energia total. O método teórico supracitado combinado a Teoria do Funcional de Densidade (DFT) foi aplicado a di-haletos do segundo ao quarto período da família 1 - MX (M= Li, Na ou K; X= F ao I), em especial, aos compostos: LiAt, NaF e KF que não possuem dados experimentais para  $I$ . **Metodologia:** O Potencial de Ionização Vertical para os compostos MX foi expresso por:  $I_V = E_{n-1} - E_n$ , onde  $E_n$  e  $E_{n-1}$  são energia eletrônica do sistema neutro e seu cátion, respectivamente. Estes foram obtidos através da otimização geométrica pelo método DFT (programa Orca), funcionais BP e PBE (com *RI approximation*) e base ANO-RCC-VTZP. Os dados obtidos foram tabelados, cada resultado com seu respectivo funcional, seguido da construção do gráfico de correlação linear - potencial de ionização vertical versus potencial de ionização experimental ( $I_{exp}$ ); obtenção da equação da reta  $y=mx-c$  ( $m$ = gradiente e  $c$ = interseção),  $R^2$  (parâmetro de correlação),  $d$  (erro médio) e  $|d|$  (erro médio absoluto); comparação entre estes e, por fim estimativa de  $I$  para compostos sem dados experimentais. **Resultados e discussões:** Os dados ( $I_V$  vs  $I_{exp}$ ) forneceram para BP a equação  $y_{BP} = 1,264x - 2,751$  com  $R^2_{BP} = 0,901$ ,  $d_{BP} = -0,364$  eV e  $|d|_{BP} = 0,424$  eV, ao passo que o PBE obteve  $y_{PBE} = 1,254x - 2,592$  com  $R^2_{PBE} = 0,904$ ,  $d_{PBE} = -0,310$  eV e  $|d|_{PBE} = 0,394$  eV. A diferença entre a utilização dos dois funcionais é sutil, apresentando o funcional PBE ligeira vantagem na correlação linear. Utilizando-o como referência, obtêm-se para os compostos selecionados os valores de Potencial de Ionização (em eV): LiF [11,22(11,30)]; LiCl [9,78(10,01)]; LiBr [9,33(9,31)]; LiI [8,82(7,5)]; NaCl [9,09(9,20)]; NaBr [8,75(8,30)]; NaI [8,25(7,6)]; KCl [8,53(8,30)]; KBr [8,22(7,85)]; KI [7,98(7,5)]. Os valores experimentais estão entre parênteses. Nota-se que os valores calculados são próximos aos experimentais, corroborando ao método. Quanto aos compostos selecionados LiAt, NaF e KF que não possuem Potencial de Ionização experimental, o funcional PBE estima 8,53 eV, 10,12 eV e 9,53 eV, respectivamente. **Considerações finais:** O Potencial de Ionização Vertical calculado pelas energias dos estados neutro e íon cátion do funcional PBE para compostos iônicos deste trabalho são, na maioria dos casos, comparáveis aos valores experimentais, implicando em desvios dentro do intervalo de 0,08 eV (LiF) a 1,32 eV (LiI), erro mínimo e máximo, respectivamente. Deste modo, foi obtido uma ótima correlação linear com a utilização de um conjunto de base relativamente grande (ANO-RCC-VTZP), possibilitando a estimativa de  $I$  para compostos LiAt, NaF e KF. Demonstrando a adequação do método  $I_V$  com DFT de funcionais GGA a baixo custo computacional e ótima precisão.

**PALAVRAS-CHAVE:** DFT, haletos de metais 1A, Potencial de ionização .

<sup>1</sup> Universidade do Estado do Pará - UEPA, hpwanzeler@gmail.com