

# Cálculo de transições Auger da molécula de CO via Monte Carlo variacional com funções de correlação explícita.

Josué de Jesus Oliveira Araújo\* e Rogério Custodio#

Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, 13083-970 Campinas – SP, Brasil  
\*j203713@dac.iqm.unicamp.br, #rogerct@unicamp.br

## Introdução

O decaimento Auger, que se notabiliza como sendo um dos processos de decaimento não-radioativos mais comuns, tem aplicação em campos como a física de plasma e astrofísica<sup>1</sup> além de ciências de materiais. O processo Auger é um processo de três elétrons; quando um feixe de radiação, tipicamente em uma faixa de energia de 3 a 30 keV, atinge um átomo, um elétron do caroço é ejetado produzindo um átomo excitado ionizado. Um elétron menos interno pode preencher a vaga resultante no nível mais baixo. Após essa transição o excesso de energia do íon do estado excitado resultante pode ser removido emitindo ou um raio-x ou emitindo um elétron denominado de elétron Auger.<sup>2</sup>

## Metodologia.

Calculou-se a energia eletrônica, do cátion do caroço ( $E^C$ ) e do dicátion formado após o processo Auger ( $E^{Fin}$ ) via Monte Carlo quântico variacional (MCV) combinado com função de correlação explícita de *Boys-Hand* e utilizou-se a eq.1 para se obter as energias de transições Auger ( $E^{TA}$ ):

$$E^{TA} = E^C - E^{Fin} \quad (1)$$

Os cálculos foram feitos com funções de base STO-15G, sendo empregados os expoentes das funções *double zeta* (DZ) de Slater e limite Hartree-Fock (HF) aumentadas com funções de polarização previamente otimizadas com o método simplex.

## Resultados e discussão.

A Tabela 1 contém as transições Auger calculadas via VMC com as funções DZ e HF. Observa-se na Tabela 1 que os valores calculados com a base HF apresentam excelente acuracidade, apresentando um erro médio de -0.5eV o que indica que o método MCV descreveu muito bem as energias dos cátions e dicátions envolvidos

no processo Auger. A otimização dos parâmetros de correlação eletrônica compensou possíveis erros entre as estruturas eletrônicas. Os cálculos com a função DZ apresentaram erros maiores que HF. Porém, pode se considerar que os desvios são aceitáveis.

**Tabela 1:** Algumas energias das transições Auger do CO, obtidas via VMC empregando as bases DZ e LH e dados experimentais, entre parentes estão os desvios absolutos.

Transições	DZ	HF	Exp. <sup>3</sup>
$(1\pi5\sigma)^3$	497,7(-2,6)	502,3(2,0)	500,3
$(1\pi5\sigma)^1$	493,0(-7,3)	495,4(-4,9)	500,3
$(4\sigma5\sigma)^3$	250,0(-4,1)	253,6(-0,5)	254,1
$(4\sigma5\sigma)^1$	244,7(-9,4)	254,0(0,1)	254,1
DAM	5,9	1,9	

## Conclusão.

Os resultados apresentados indicam que VMC é uma boa alternativa com considerável exatidão para o cálculo de transições Auger. É um método de implementação mais simples que outros da literatura, produzindo resultados animadores. Um conjunto maior de transições e de moléculas está sendo estudado para avaliar o uso de funções de base menores como a DZ e SZ nesses cálculos.

## Referências

1. A. Hult Roos, J. H. D. Eland, J. Andersson, M. Wallner, R. J. Squibb, R. Feifel *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **21**, 9889 (2019).
2. Bhavyasri, K.; Sreshta, M.; Swethasri, R. *Asian J. Pharm. Res. Dev.*, **7**, 100 (2019).
3. E. Moddeman, A. C. Thomas, O. K. Manfredo, *J. Chem. Phys.*, **55**, 2317 (1971).

## Agradecimentos

Os autores agradecem a Fapesp, através do Cepid-CCES (2013/08293-7) e a Capes pela bolsa.