



E322

ESTUDO TEÓRICO DO EFEITO RAMAN PRÉ-RESSONANTE DO ÍON NITRATO EM SOLUÇÃO.

Alex Freitas Ramos (Bolsista SAE/PRG) e Prof. Dr. Pedro A. M. Vazquez (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

O espectro Raman pré-ressonante fornece informações importantes sobre a estrutura do estado fundamental, através das frequências vibracionais, e sobre as propriedades do estado excitado através das intensidades Raman. Os perfis de excitação pré-ressonante Raman para o íon NO_3^- isolado e alguns complexos do tipo $(\text{NO}_3^-) \cdot n\text{H}_2\text{O}$ foram calculados teoricamente no intervalo espectral de 250 a 200 nm. O objetivo era desenvolver e testar uma nova metodologia e estratégia de cálculo visando reduzir o custo computacional deste tipo de cálculo e aprimorar os resultados obtidos. As geometrias moleculares foram otimizadas e as matrizes Hessianas foram obtidas com os níveis de teoria MP2 e CCSD. As intensidades Raman e os perfis de excitação pré-ressonante foram calculados utilizando a teoria de resposta linear com o nível de teoria Hartree-Fock e com conjunto de funções de base de Sadlej. Estes resultados foram comparados com os cálculos encontrados na literatura e com resultados experimentais observando-se a qualidade de cálculo e o menor custo computacional.

Intensidades Raman – Raman Pré-Ressonante – Nitrato