

E385

DESENVOLVIMENTO DE CONJUNTOS DE BASE USANDO EXPRESSÕES POLINOMIAIS SEM E COM EFEITOS RELATIVÍSTICOS EMPREGADAS NO ESTUDO DE PROPRIEDADES ELETRÔNICAS

José Carlos Barreto de Lima (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Nelson Henrique Morgon (Orientador), Instituto de Química – IQ, UNICAMP

O uso da função de onda da equação de Schödinger permite a descrição de propriedades eletrônicas de espécies químicas. Esta equação possui solução exata somente para sistemas monoelétrônicos. Sistemas multieletrônicos só podem ser estudados com aproximações. Assim, em sistemas moleculares, a função de onda pode ser representada por orbitais moleculares, e estes por sua vez, como uma combinação linear de orbitais atômicos. Os orbitais atômicos podem ser descritos por funções gaussianas, as quais têm forma geral $\exp(-\alpha r^2)$. Neste trabalho utilizou-se polinômios para a representação do conjunto de expoentes α (denominado conjunto de base). Os conjuntos de base foram gerados em ambientes não-relativístico (sem e com correlação eletrônica: HF, MP2 e DFT, respectivamente) e relativístico. Como exemplo tem-se o átomo de Cl onde o polinômio que melhor descreveu o conjunto de base foi o de quinto grau, tanto para o método HF como para MP2 e DFT. No ambiente relativístico observou-se que os conjuntos de base procuram representar os elétrons da camada interna (contração da nuvem eletrônica), sendo que resultados com polinômios de grau cinco e dez não foram muito diferentes.

Conjunto de Base Atômica - Correlação Eletrônica - Efeito Relativístico