



E0616

O USO DO MÉTODO MONTE CARLO QUÂNTICO PARA O CÁLCULO DE ENERGIAS DE IONIZAÇÃO DE VALÊNCIA E CAMADAS INTERNAS DE MOLÉCULAS DIATÔMICAS

Eduardo José Creato (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Rogerio Custodio (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Estudos de estrutura eletrônica de moléculas em seu estado fundamental são muito bem tratados por vários métodos quânticos, porém, estados eletrônicos excitados ou íons na valência ou em camadas mais internas, apresentam problemas de estabilidade e precisão. Os métodos denominados de Monte Carlo Quântico (MCQ) vêm apresentando resultados satisfatórios em termos de precisão para diversos sistemas. O presente projeto visa o uso de funções de onda provenientes do método Hartree-Fock (HF) no método Monte Carlo Variacional e de Difusão através de programas desenvolvidos pelo grupo analisando-se a capacidade de correção de efeitos de correlação eletrônica no sistema neutro e em potenciais de ionização molecular e respectivas curvas de potencial de LiH incluindo-se ou não correlação explícita. Foram obtidas curvas de potencial para esta molécula em seu estado fundamental e seu íon monovalente na camada mais externa, bem como parâmetros espectroscópicos, evidenciando a eficácia do método quando se adiciona correlação explícita. Dificuldades referentes à descrição das funções de onda com HF foram encontradas ao se aplicar a mesma metodologia para o íon mais interno. No presente momento o estudo deste sistema vem sendo realizado com funções de onda do tipo Interação de Configurações (CI).

Monte Carlo Quântico - Potencial de ionização - Parâmetros espectroscópicos