



E0603

AVALIAÇÃO DO FUNCIONAL CAM-B3LYP E PSEUDO-POTENCIAIS PSTUTT GART NO CÁLCULO DE POLARIZABILIDADES MOLECULARES E ATIVIDADES RAMAN DINÂMICAS

André Hernandes Alves Malavazi (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Pedro Antonio Muniz Vazquez (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Este trabalho consiste na avaliação da viabilidade das bases ECP pStuttgart em conjunto com o funcional CAM-B3LYP para o cálculo de atividades Raman. Para análise do desempenho foram utilizados como referência os resultados obtidos para cinco moléculas de pequeno porte no nível CCSD usando a base Sadlej-pVTZ. As energias de excitação, polarizabilidades e intensidades Raman dinâmicas foram calculadas usando a base completa Sadlej-pVTZ em ambos os níveis de teoria, em seguida os cálculos foram repetidos usando o pseudo-potencial. Os resultados mostram que no nível DFT, tanto o ECP quanto a base Sadlej-pVTZ possuem desempenhos parecidos em relação à referência, e uma demanda computacional inferior ao CCSD, da ordem de 95,4%. Com relação aos valores das atividades Raman, desvios de até 42,6% foram observados para a molécula de acetileno, provavelmente causados pela simplificação teórica utilizada pelo método TD-DFT para modelar os estados eletrônicos excitados, resultando neste desvio para esta molécula onde essa descrição correta é essencial. Concluimos, portanto, que o uso do ECP gera resultados satisfatórios, dentro de certos limites, com uma redução considerável dos custos computacionais permitindo seu uso para este tipo de cálculos.

Espectroscopia Raman - Química teórica - Teoria da resposta linear