



E0604

AVALIAÇÃO DO DESEMPENHO DOS PSEUDO-POTENCIAIS PSTUTTART NO CÁLCULO DE POLARIZABILIDADES MOLECULARES E ATIVIDADES RAMAN DINÂMICAS NO NÍVEL AB INITIO CCSD

Camile Fraga Delfino Kunz (Bolsista PIBIC/CNPq), André Hernandes Alves Malavazi, Gabriel Mello Silva e Prof. Dr. Pedro Antonio Muniz Vazquez (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Neste trabalho, foram calculadas as atividades de espalhamento Raman descritas pela Teoria da Polarizabilidade de Placzek, as bases de pseudo-potencial pStuttgart foram estudadas em relação à base completa Sadlej-pVTZ, no nível de teoria CCSD. Primeiramente calcularam-se estas propriedades para cinco moléculas de pequeno porte (H_2O , NH_3 , CH_4 , NH_3 e C_2H_2) utilizando a Sadlej-pVTZ e, em seguida, os mesmos cálculos foram realizados com a pStuttgart, ambos no nível de teoria CCSD. Os resultados obtidos pelo pseudo-potencial foram comparados para cada frequência de excitação e o que observou-se foi que o ECP subestimou os valores obtidos, por exemplo, para a molécula de acetileno, a atividade Raman calculada com o pseudo-potencial obteve 101,5 como resultado, enquanto com a base completa 106,8 e experimentalmente obteve-se $125,5 \pm 11,6$ para uma dada frequência. Apesar deste desvio, os dados foram relativamente compatíveis e o desvio relativo máximo obtido entre eles foi da ordem de 20%. Pode-se concluir que o ECP estudado produz resultados aceitáveis para o cálculo de intensidades Raman a um custo computacional bem menor que o das bases full-electron tornando-se uma alternativa para o estudo de para moléculas grandes com um número grande de elétrons.

Espectroscopia Raman - Química teórica - Teoria da resposta linear