



E0605

**CÁLCULO DE POLARIZABILIDADES MOLECULARES E ATIVIDADES RAMAN DINÂMICAS UTILIZANDO A TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE E PSEUDO-POTENCIAIS**

Gabriel Mello Silva (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Pedro Antonio Muniz Vazquez (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Com o intuito de encontrar uma função de onda para cálculos de propriedades moleculares que propicie o melhor desempenho, ou seja, menores gastos computacionais e manutenção na qualidade da representação, foi feito um estudo comparativo das atividades Raman, calculadas computacionalmente, de cinco pequenas moléculas empregando o método PBE0/ecp-pStuttgart em comparação à referência CCSD/Sadlej-pVTZ. Analisando os dados, verificou-se que o primeiro apresenta valores de atividade Raman próximos à referência, indicando a eficiência do método. Porém, para a molécula de C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, tais valores apresentaram discrepância maior do que a observada para as outras moléculas, tendo aquela um erro médio quadrático muito maior. Isto é causado pela limitação de quando excitações duplas são necessárias para representar corretamente os estados excitados, o que não é possível através deste método TD-DFT. Apesar disso, os resultados são satisfatórios, e isso é acentuado pela diminuição drástica do tempo de cálculo, com uma diferença relativa de até 96% entre PBE0/ecp-pStuttgart e CCSD/Sadlej-pVTZ. Portanto, ao que diz respeito à redução computacional (tempo de cálculo e memória utilizada) e à proximidade quantitativa entre ambos, o método analisado se mostrou uma alternativa para o estudo de sistemas com muitos átomos.

Espectroscopia Raman - Química teórica - Teoria da resposta linear