



E0569

O USO DO MÉTODO MONTE CARLO QUÂNTICO DE DIFUSÃO NO CÁLCULO DE ENERGIAS DE IONIZAÇÃO DE VALÊNCIA E CAMADA INTERNA PARA MOLÉCULAS SIMPLES

Leandro de Abreu (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Rogério Custodio (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Este projeto corresponde a uma etapa de avaliação sistemática do uso do método Monte Carlo Quântico. Pretendeu-se considerar o estudo das energias eletrônicas e de ionização vertical (de valência e internas) de hidretos diatômicos no estado fundamental contendo elementos do segundo período da tabela periódica, analisando-se a capacidade das simulações corrigirem efeitos de correlação eletrônica, incluindo-se ou não fatores de correlação explícitos. A partir dos resultados obtidos, verificou-se ser possível obter, para as moléculas neutras, energias eletrônicas com uma taxa elevada de recuperação da energia de correlação eletrônica. Um exemplo disto foi o resultado obtido para LiH ($E_{\text{elDMCQ}}: -8,071 \text{ hartrees}$; $E_{\text{experimental}}: -8,0703 \text{ hartrees}$). Os valores de energias de ionização calculados, em geral, concordaram com valores encontrados na literatura e na maioria dos casos, utilizando-se o método DMCQ, obteve-se um erro percentual relativo menor que 4%. Porém, é necessário utilizar alguma alternativa para melhorar a descrição de alguns íons, principalmente relativos às moléculas NH e OH que chegaram a apresentar erros percentuais relativos maiores que 10%. Um exemplo disto foi a energia de ionização obtida para a molécula OH na formação do íon $\text{OH}^+ 1\sigma^2 2\sigma^2 3\sigma^2 1\pi^{1(\alpha)} 1\pi^{1(\beta)}$ ($E_{\text{DMCQ}}: 14,285 \text{ eV}$; $E_{\text{experimental}}: 16,64 \text{ eV}$). Uma possibilidade é o uso da matriz densidade ao invés do uso de determinantes de Slater. Outra possibilidade é o uso de funções de onda multiconfiguracionais. Cálculos nesse sentido estão sendo realizados.

Monte Carlo de Difusão - Energia de ionização - Elétrons liternos