



E0594

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

Eduardo José Creatto (Bolsista FAPESP), Leandro de Abreu e Prof. Dr. Rogério Custodio (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

O interesse em energias de ionização pode ser identificado pelo seu uso frequente em diferentes áreas da ciência, por medidas experimentais precisas e estimativas teóricas que proporcionem interpretação de dados de espectroscopia fotoeletrônica, por exemplo. Os métodos denominados de Monte Carlo Quântico vêm sendo identificados como um dos modelos mais promissores em termos de nível de precisão próximo do exato para sistemas atômicos, moleculares e sólidos. O presente projeto aplicou o Monte Carlo Variacional e o Monte Carlo de Difusão através dos programas desenvolvidos pelo grupo para o cálculo de curvas de potencial no estado fundamental e estados ionizados eletrônicos, bem como obtenção de parâmetros espectroscópicos destas para a molécula LiH. As simulações realizadas utilizando-se funções de onda guia provenientes de cálculos Hartree-Fock mostraram-se capazes de corrigir efeitos de correlação eletrônica, visto que a energia obtida na geometria de equilíbrio, por exemplo, é -8,07148 u.a., apenas 0,00018 u.a. abaixo da exata. As mesmas condições foram mantidas, e acrescentou-se 9 parâmetros de correlação explícita de Boys, obtendo-se uma energia de -8,07068 u.a., apenas 0,00062 u.a. acima da exata. Valores de propriedades espectroscópicas também atingiram precisão significativa. Curvas de potencial obtidas para cálculos apresentam mínimo bem menos pronunciado. Porém resultados mais conclusivos das propriedades destas curvas de dissociação estão em estudo. (CNPq, FAPESP, FAEPEX)

Monte Carlo quântico - Potencial de ionização - Parâmetros espectroscópicos