



E0584

CÁLCULO DE ENERGIAS DE EXCITAÇÃO: UM ESTUDO COMPARATIVO CC VS DFT

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

Este trabalho consiste na comparação de dois métodos teóricos/computacionais (DFT e CC), através do cálculo da energia de excitação de algumas moléculas (água, amônia, metano, acetileno e formaldeído). Para uma abordagem mais abrangente dos resultados, ambos os níveis de teoria utilizaram as bases Sadlej-pVTZ e aug-cc-pVTZ. Para DFT, foram utilizados os funcionais CAM-B3LYP e PBE0, já para CC apenas o nível CCSD. Ao analisar os dados obtidos observa-se, certa proximidade na energia calculada pelas duas bases, apenas com uma diferença mais acentuada para estados de excitação menos elevados, além disso, fica evidente a variação entre os funcionais do DFT, visto que para CAM-B3LYP os valores são ligeiramente maiores. Enfim, há uma diferença significativa entre DFT e CC, para o último os valores são maiores, mas sabemos também, por resultados experimentais, que são os mais próximos da realidade. Podemos concluir daqui, que talvez seja viável utilizar o método DFT para cálculos menos precisos, já que ele exige menos esforço computacional e tempo, para isso o funcional CAM-B3LYP parece ser a escolha mais qualificada para estados de excitação mais baixos, já o PBE0 para estados mais altos. (CNPq)

Teoria do funcional da densidade - Teoria Coupled Cluster - Espectroscopia eletrônica