



XVI congresso interno de iniciação científica

Ginásio Multidisciplinar da Unicamp
24 a 25 de setembro de 2008



E0582

APLICAÇÕES DO MÉTODO MONTE CARLO QUÂNTICO NO CÁLCULO DE ENERGIAS E PROPRIEDADES ELETRÔNICAS PARA ESTADOS FUNDAMENTAL E EXCITADOS DE MOLÉCULAS DIATÔMICAS SIMPLES

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

Este projeto corresponde a uma avaliação do uso do método Monte Carlo Quântico no estudo da energia de moléculas simples em geometrias fora do equilíbrio, no estado fundamental e em estados excitados de baixa energia. A partir dos resultados obtidos e comparações com resultados da literatura, observa-se uma excelente concordância nos resultados obtidos para a molécula de H₂ e LiH no estado fundamental, principalmente levando-se em conta que foram utilizados apenas as função de onda guia da respectiva geometria de equilíbrio para a obtenção de todos os pontos da curva de potencial. A dissociação é correta e o nível de precisão é considerável em relação a métodos tradicionais e mais elaborados de estrutura eletrônica. Os resultados para os estados excitados singlete e triplete sugerem a necessidade de um estudo mais profundo com alternativas de funções de onda. Esta declaração é em caráter mais geral, uma vez que novas funções de onda podem estar associadas a melhores conjuntos de base ou maior número de determinantes ou ao uso de um determinante sem a separação de spins através da teoria de matriz densidade. (CNPq, FAPESP)

Monte Carlo Quântico de Difusão - Estrutura Eletrônica - Curvas de potencial