



E0585

### **IMPORTÂNCIA DA CORRELAÇÃO ELETRÔNICA E A DEPENDÊNCIA DO CONJUNTO DE BASES NAS ENERGIAS DE EXCITAÇÃO ELETRÔNICA**

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

Com o intuito de estudar a importância da correlação eletrônica e a dependência do conjunto de bases nas energias de excitação eletrônica, realizamos cálculos teóricos utilizando as funções de onda CCSD/Sadlej-pVTZ, CCSD/aug-cc-pVTZ, CC3/Sadlej-pVTZ e CC3/aug-cc-pVTZ para um conjunto de moléculas poliatômicas (água, amônia, metano, acetileno e formaldeído). A análise dos resultados obtidos mostrou que não existem diferenças significativas nas energias de excitação calculadas com a função de onda CCSD/Sadlej-pVTZ e a CC3/aug-cc-pVTZ. Por outro lado, os cálculos CC3/aug-cc-pVTZ consumiram significativamente mais tempo que os CCSD/Sadlej-pVTZ, (p. ex. 51 minutos contra apenas 4 minutos no caso da molécula de água). Ou seja, a grande diferença de custo computacional não resulta em diferenças significantes no estudo das energias de excitação do grupo de moléculas estudadas e que, portanto, a função de onda CCSD/Sadlej-pVTZ produz energias de excitação em excelente concordância com o método mais sofisticado a um custo computacional bem mais baixo. Com base nisto, esta função de onda será adotada como referência para calibrações de cálculos de polarizabilidades e atividades Raman utilizando teoria DFT e pseudopotenciais. (CNPq)

Teoria coupled cluster - Espectroscopia eletrônica - Química teórica