



E0586

CÁLCULO TDDFT DE POLARIZABILIDADES ELÉTRICAS MOLECULARES: UM ESTUDO COMPARATIVO DOS FUNCIONAIS PBE0 E CAM-B3LYP

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

Com o intuito de encontrar uma função de onda para cálculos de propriedades elétricas moleculares que propicie o melhor desempenho, isto é, melhor relação custo/desempenho, foi feito um estudo comparativo da polarizabilidade molecular da molécula de acetileno empregando os métodos PBE0 e CAM-B3LYP e as bases Sadlej-pVTZ e aug-cc-pVTZ. Como referência, escolhemos o método CCSD com as bases Sadlej-pVTZ e aug-cc-pVTZ. Analisando os resultados, verificamos que o método PBE0 apresenta valores de polarizabilidade média maiores do que o método de referência. No caso do CAM-B3LYP, a sobre-estimacão mostrou-se mais acentuada, sugerindo que este método é menos apropriado que PBE0 o qual se mostrou, também, mais eficiente computacionalmente. Os tempos totais de cálculo para o PBE0 foram, em média, cerca de 50% dos tempos consumidos com CAM-B3LYP, ou seja, além de fornecer resultados mais próximos da nossa referência, o método PBE0 ainda apresentou um custo computacional menor. Porém os valores de anisotropia da polarizabilidade apresentaram maior discrepância em relação à CCSD com PBE0, mas ambos sobre-estimam os valores de referência. Estes resultados sugerem que é necessário ampliar o número de moléculas estudadas para caracterizar o desempenho destes funcionais. (CNPq)

Teoria do funcional da densidade - TDDFT - Química teórica