

Programa Institucional de Bolsas
de Iniciação Científica

24 a 26 outubro de 2012

Pró-Reitoria de Pesquisa - Pibic/CNPq

Pró-Reitoria de Graduação - SAE/ Unicamp



E0703

OBTENÇÃO DE PARÂMETROS ÚTEIS EM CÁLCULOS DE ESTRUTURA ELETRÔNICA USANDO MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO

Felipe Diego dos Santos Wieira (Bolsista SAE/UNICAMP e IC CNPq) e Prof. Dr. Nelson Henrique Morgon (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Para qualquer sistema molecular, exceto átomos hidrogenóides, a função de onda é altamente complexa, impossibilitando a resolução analítica da Equação de Schrödinger. Assim, é necessário o desenvolvimento de conjuntos de funções de base, que combinadas representam de modo aproximado a estrutura eletrônica de tais sistemas. Estes conjuntos podem ser desenvolvidos através de diversos métodos de otimização, que se baseiam em obter os coeficientes das bases, minimizando-se a energia total do sistema. Nesse trabalho, conjuntos de funções de base serão obtidos através da otimização de funções gaussianas utilizando-se Algoritmos de Otimização Baseados em Enxame (swarm-based algorithm) e de Busca Estocástica. Os mesmos algoritmos serão usados também no processo de otimização de geometrias moleculares. Até o momento o aluno familiarizou-se com o uso dos programas de cálculos teóricos (GAMESS e Gaussian) e no desenvolvimento de funções de base para elementos do segundo período (Li-Ne) através do método SIMPLEX, além do estudo de linguagens de programação para desenvolvimento dos programas de otimização.

Otimização - Geometria molecular - Funções de base