



E0722

O USO DO MÉTODO MONTE CARLO QUÂNTICO PARA O CÁLCULO DE ENERGIAS DE IONIZAÇÃO DE VALÊNCIA E CAMADAS INTERNAS DE MOLÉCULAS DIATÔMICAS – PARTE II

Eduardo José Creatto (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Rogério Custodio (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

O Método Monte Carlo tem sido frequentemente usado para a obtenção de observáveis de moléculas ou átomos dada uma função de onda obtida por outros métodos de química quântica. Os principais são o Monte Carlo Quântico Variacional e o de Difusão. Durante o estudo destes métodos deparamo-nos com uma alternativa do método variacional, em que ao invés de utilizar a função de onda a partir de outro método quântico, a mesma foi gerada no próprio cálculo simultaneamente a determinação da energia do sistema. O método consiste no uso do princípio variacional, números aleatórios, uma malha fixa de valores de coordenadas e valores arbitrários para a função de onda. Para estados excitados também se utilizou a condição de ortogonalização. Em cada passo Monte Carlo a função de onda tentativa é modificada aleatoriamente e a energia é calculada com esta nova função; se seu valor for menor que o anterior a função é mantida, caso contrário ela é restabelecida. São efetuados tantos passos quanto à precisão desejada, ou até que a observável se mantenha constante. Em nossos estudos efetuamos simulações para a partícula na caixa de 1 e 2 dimensões, oscilador harmônico e anarmônico. Em todos os casos obtivemos tanto a função de onda quanto as respectivas energias exatas. (FAPESP, FAEPEX)

Monte Carlo Quântico - Potencial de ionização - Parâmetros espectroscópicos