

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



E0723

IMPLEMENTAÇÃO DE PSEUDOPOTENCIAL NA TEORIA G3(MP2) PARA MOLÉCULAS CONTENDO ÁTOMOS DO PRIMEIRO, SEGUNDO E TERCEIRO PERÍODO DA TABELA PERIÓDICA

Lívia de Faria Tosta, Douglas Henrique Pereira e Prof. Dr. Rogério Custodio (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Métodos compostos de química quântica são amplamente utilizados para reproduzir dados termodinâmicos com alta precisão. Dentre esses métodos, destaca-se a teoria Gaussian-n (G_n) a qual apresenta excelentes resultados para cálculos de propriedades termodinâmicas com desvios médios absolutos em relação a dados experimentais menores que 2 kcal mol^{-1} . A teoria G3(MP2) apresenta um custo computacional elevado para moléculas grandes. Com o objetivo de reduzir esse custo sem perder a precisão dos resultados, introduziu-se o pseudopotencial CEP, em substituição aos elétrons de caroço, na teoria G3(MP2), G3CEP(MP2). Para tanto se removeu as seis primeiras funções de base internas para todas as bases de maneira a separar os elétrons internos dos elétrons de valência. Até o momento, o desvio médio absoluto obtido foi de $3,5 \text{ kcal mol}^{-1}$ para o método G3(MP2)CEP contra $1,5 \text{ kcal mol}^{-1}$ do método G3(MP2) o que indica a necessidade de otimização do método aplicado. Aplicações do mesmo método na teoria G3 permitiram determinar propriedades termoquímicas com mesmo nível de precisão do método original e com custo computacional até 70% inferior. (FAPESP, FAEPEX)

G3(MP2) - Pseudopotencial - G3CEP