

ESTUDO DE PROPRIEDADES ESPECTROSCÓPICAS DE SISTEMAS DIATÔMICOS DE INTERESSE ATMOSFÉRICO

Marcelo Motta Venchiarutti¹ (USP, Bolsista PIBIC/CNPq)
Patricia Regina Pereira Barreto² (LAP/INPE, Orientador)

RESUMO

Para se estudar, com rigor, sistemas moleculares é necessário usar os princípios da química quântica molecular, que tem como ponto de partida, a resolução da equação de Schrödinger. Devido à complexidade decorrente de tal resolução, é conveniente a utilização de algumas simplificações, a primeira delas é a aproximação de Born-Oppenheimer, que separa a equação de Schrödinger em duas partes: uma eletrônica e outra nuclear. A parte eletrônica é resolvida via códigos computacionais de estrutura eletrônica, enquanto que a parte nuclear pode ser solucionada via superfície de energia potencial (SEP). No estudo da estrutura eletrônica, os núcleos são congelados e os elétrons são otimizados, num processo que é realizado iterativamente até se obter a configuração de mínima energia (região de equilíbrio). Para o estudo da contribuição nuclear, fazem-se cálculos em diferentes configurações nucleares, o que possibilita a obtenção de curvas de energia potencial em função da distância nuclear. Estas curvas podem ser ajustadas através de funções analíticas e assim, gerar propriedades espectroscópicas importantes sobre o sistema em questão. Para o estudo de sistemas moleculares via métodos *ab initio* é necessário a escolha dos níveis de cálculos que reproduzam rigorosamente os dados experimentais e/ou teóricos sem comprometer o custo computacional. Esse projeto de iniciação científica consiste na construção das SEPs de sete espécies diatômicas de interesse atmosférico, neutras e carregadas positivamente e negativamente, sendo elas: CO, O₂, N₂, H₂, OH, NO e SO. O programa computacional utilizado para esses cálculos foi o Gaussian03. As espécies diatômicas foram otimizadas via Couple Cluster incluindo as excitações simples, duplas e triplas [CCSD(T)] e via MP2 a fim de comparar os dois níveis de cálculo. Como complemento deste trabalho, algumas espécies poliatômicas de interesse do grupo de pesquisa como o CO₂, SO₂ e H₂O foram otimizadas via MP2. As funções de base estudadas foram as cc-pVXZ e aug-cc-pVXZ, com X = D, T, Q e 5. Para a construção das SEPs das espécies diatômicas utilizou-se a metodologia CCSD(T) com a função base cc-pVQZ, pois foi a que melhor reproduziu os dados de geometria, frequência e momento de dipolo das espécies estudadas. Para cada SEP foram determinados 101 pontos que foram ajustados para uma função de Rydberg de quinta ordem, via ajustes não lineares com oito parâmetros ajustáveis. Com a função analítica gerada foi possível aplicar a técnica de Dunham e obter as propriedades espectroscópicas dos diátomos, tais como: distância de equilíbrio, energia de dissociação, frequência harmônica e mais outras 10 propriedades anarmônicas.

¹ Aluno do Curso de Engenharia Química, USP/Lorena. E-mail: motta_motta@hotmail.com

² Pesquisador da Divisão de Física de Plasma. E-mail: patricia@plasma.inpe.br