

ESTUDO DE PROPRIEDADES ESPECTROSCÓPICAS DE ESPÉCIES DIATÔMICAS DE INTERESSE ATMOSFÉRICO

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

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. Este processo 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 iniciado em março de 2009 consiste na construção das SEPs de cinco espécies diatômicas de interesse atmosférico, neutras e carregadas positivamente e negativamente, sendo elas: CO, O₂, N₂, H₂ e OH. O programa computacional utilizado para esses cálculos foi o Gaussian03. Estas espécies foram otimizadas via Couple Cluster incluindo as excitações simples, duplas e triplas [CCSD(T)], com reconhecida precisão nas regiões de repulsão (distância interatômica pequena), de atração (região de poço de potencial) e de dissociação (distância interatômica grande). 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 utilizou 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. Para a continuidade deste projeto estão programadas o estudo de moléculas maiores do tipo H₂O, CO₂, CH₄, NO₂, e cálculos de energia de interação do tipo van der Waals utilizando os métodos de expansão multipolar, supramolecular ou SEPs.

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