

## COMPARAÇÃO DO DESEMPENHO DE FUNÇÕES DE ONDA EXPLICITAMENTE CORRELACIONADAS NO CÁLCULO DE PROPRIEDADES FÍSICAS DA MOLÉCULA DE HIDROGÊNIO

Kelen Berra de Mello<sup>(1)</sup>, Cláudio Antônio Perotoni<sup>(2)</sup> – Departamento de Física e Química/Universidade de Caxias do Sul.

Propriedades físicas da molécula de H<sub>2</sub>, como a energia de ligação, a distância interatômica de equilíbrio e o número do onda de modo de estiramento, foram calculadas a nível HF e DFT, expandindo a função de onda como uma combinação linear de orbitais atômicos. Os cálculos a nível HF e DFT foram efetuados com diferentes funções de base, utilizando o programa de primeiros princípios NWCHEM. Estes resultados foram comparados com os valores obtidos a partir de funções de onda explicitamente correlacionadas, do tipo James-Coolidge. Os cálculos obtidos a nível HF com diferentes funções de base, resultaram uma energia de ligação média  $\langle E \rangle = -3,4481$  eV, uma distância interatômica de equilíbrio média  $\langle d \rangle = 0,7314$  Å e um número de onda médio para o modo de estiramento  $\langle \nu \rangle = 4170,2909$  cm<sup>-1</sup>. Os resultados a nível DFT forneceram  $\langle E \rangle = -4,7109$  eV,  $\langle d \rangle = 0,7476$  Å e  $\langle \nu \rangle = 4389,4727$  cm<sup>-1</sup>. Os cálculos com funções explicitamente correlacionadas de James e Coolidge, resultaram  $\langle E \rangle = -4,7295$  eV,  $\langle d \rangle = 0,7352$  Å,  $\langle \nu \rangle = 4595,5865$  cm<sup>-1</sup>. Os valores experimentais para a molécula de H<sub>2</sub> são  $\langle E \rangle = -4,74466$  eV,  $\langle d \rangle = 0,7416$  Å, e  $\langle \nu \rangle = 4317,900$  cm<sup>-1</sup>. A partir da comparação com os valores experimentais foi possível verificar o efeito de ausência de qualquer tratamento da correlação eletrônica nos resultados obtidos a nível HF e a qualidade dos funcionais empregados na aproximação DFT. Funções de base explicitamente correlacionadas constituem uma boa alternativa para o estudo de determinados sistemas físicos. A abordagem deste trabalho, que combina o uso de sofisticados programas de computador para a realização de cálculos a nível HF e DFT e, também, o emprego do método variacional para o cálculo de funções de onda explicitamente correlacionadas, constitui uma interessante iniciação aos métodos de cálculo *ab initio* empregados em Física e áreas correlacionadas.

Palavras-chave: molécula de hidrogênio, cálculo de *ab initio*, correlação eletrônica.

(1) Bolsista de Iniciação Científica PIBIC/CNPq

(2) Orientador

Apoio: UCS, CNPq