



Sessão de Matemática e Física I  
Dia 06/11/14 – 13h20 às 15h40  
Unila-PTI - Bloco 09 – Espaço 03 – Sala 03

## MODELAGEM DAS MOLÉCULAS CORRESPONDENTES AOS LIMITES DE DISSOCIAÇÃO DO SISTEMA HSO<sub>2</sub> AO NÍVEL COUPLED-CLUSTER

**Anderson Luis Oliveira Maran**

Estudante do curso de graduação em Engenharia de Energias Renováveis

Bolsista Probic - Unila

[anderson.maran@unila.edu.br](mailto:anderson.maran@unila.edu.br)

**Juan de Dios Garrido Arrate**

Professor Adjunto II

Instituto Latino-Americano de Ciências da Vida e da Natureza - ILACVN

Orientador

[juan.garrido@unila.edu.br](mailto:juan.garrido@unila.edu.br)

**Norma Beatriz Caballero**

Professora Visitante

Instituto Latino-Americano de Ciências da Vida e da Natureza - ILACVN

Co-orientadora

[norma.caballero@unila.edu.br](mailto:norma.caballero@unila.edu.br)

**Resumo:** Compostos de enxofre desenvolvem um importante papel nas reações químicas que ocorrem na atmosfera, podendo acarretar problemas como a poluição do ar, a chuva ácida e mudanças climáticas globais. Diversos estudos do sistema HSO<sub>2</sub> têm sido empregados com o intuito de caracterizar a Superfície de Energia Potencial (SEP) para o estado eletrônico básico do sistema. Este trabalho, se soma a esses estudos apresentando cálculos *ab initio* de alto nível dos estados eletrônicos básicos das moléculas que são obtidas nos limites de dissociação da SEP correspondente ao sistema HSO<sub>2</sub> usando o método de cálculo *ab initio* denominado em inglês Coupled Cluster. Neste trabalho serão reportados os cálculos otimizados ao nível Coupled Cluster com excitações simples e duplas, incluindo correções para excitações triplas usando teoria de perturbações (CCSD(T)), utilizando as bases de funções consistentes em relação à energia de correlação eletrônica introduzidas pelo Dunning incluindo uma função extra de ajuste d (aug-cc-pV(X+d)Z) para o átomo de enxofre e funções aug-cc-pVXZ para os átomos de hidrogênio e oxigênio. As otimizações foram feitas com X=3. Os cálculos pontuais com X=2, 4 e 5, para a extrapolação a base infinita da energia das diferentes moléculas, foram feitos em acordo à metodologia usual que utiliza a geometria otimizada (neste caso com X=3). As energias do ponto-zero da energia vibracional e as frequências de vibração dos modos normais de vibração molecular foram obtidos ao mesmo nível de cálculo. As extrapolações para a base infinita foram calculadas usando modelos de dois e de três parâmetros comumente empregados na literatura. Foram realizadas comparações com os dados teóricos e experimentais da literatura especializada. A concordância com os dados experimentais é boa.

**Agradecimentos:** Agradecemos à UNILA pela concessão da bolsa de iniciação científica e ao LCAD pelas facilidades de cálculo.

**Palavras-chave:** enxofre, combustão, energia, geometria, frequências.