



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 HSO₂ 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

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

Norma Beatriz Caballero

Professora Visitante

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

Co-orientadora

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 HSO₂ 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 HSO₂ 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.