

# Estudio Coupled Cluster de potenciales de interacción en complejos de Van der Waals

**Título:** Estudio Coupled Cluster de potenciales de interacción en complejos de Van der Waals

**Autor/a:** José Luis Cagide Fajín

**Centro de lectura:** Facultade de QUÍMICA

**Data Lectura:** 13 Out 2006

**Departamento:** Depto. de QUÍMICA FÍSICA

A avaliación teórica dos espectros rovibracionais en complexos de Van der Waals pódese afrontar dende diversos niveis de complexidade, sendo preciso o emprego de métodos ab initio para conseguir resultados precisos, se o que se busca é conseguir unha aproximación pódese utilizar métodos semiempíricos, nos cales se empregan parámetros axustables que se axustan dacordo a datos experimentais. Na avaliación de espectros rovibracionais en complexos de Van der Waals pártese da superficie de enerxía potencial para resolver a ecuación nuclear de Schödinger e así obter os distintos niveis rovibracionais. Considerando isto, para obter resultados precisos é necesario coñecer con precisión a superficie de enerxía potencial. O cálculo destas superficies de enerxía potencial pódese abordar dende diferentes métodos, sendo os ab initio os máis precisos. Dentro destes métodos destaca pola súa precisión o método Coupled cluster single and double with a perturbative estimation of the triple excitations CCSD(T). A utilización deste método implica a necesidade de usar unhas bases de cálculo adecuadas, que teñan a calidade suficiente para que non se vexa comprometida a precisión dos cálculos, con este fin usamos as bases propostas por Dunning xaug-cc-pVXZ (x-augmented-correlation-consisten-polarize-Valence-XZ), incrementadas con unha serie de funcións midbond co fin de mellorar a descripción do complexo nesta rexión de enlace intermedia, onde x = d (augmented ou double augmented) e X é o denominado número cardinal que toma os valores de D, T, Q, 5, 6. Estas bases empregáronse para describir todos os átomos do complexo a non ser aqueles que presentan un elevado número de electróns, nos cales hai que ter en conta efectos relativistas. Estes téñense en conta empregando bases provistas de pseudopotenciais, como as SDB-aug-cc-pVXZ; onde X = T ou Q. E mantendo a correspondente base de Dunning para os demais átomos. A obtención das superficies abórdouse dende o denominado single-point ou o que é o mesmo calculando a enerxía de interacción de forma individualizada para cada punto a considerar na superficie de enerxía potencial. Para a obtención da enerxía de interacción intermolecular usamos o método da supermolécula, polo cal obtemos a enerxía de interacción intermolecular como a diferenza entre a enerxía do complexo e a suma das enerxías dos seus fragmentos, co fin de minimizar o erro debemos usar a corrección counterpoise, para eliminar o erro de superposición de base. Os programas utilizados para realizar estes cálculos foron Dalton, AcesII e GAUSSIAN 03. Unha vez obtida a superficie de enerxía potencial procedemos ó seu axuste a unha función matemática adecuada, a cal utilizamos para a resolución da ecuación nuclear de Schödinger e por tanto para a obtención do espectro rovibracional. O programa empregado para a realización dos axustes foi MATLAB. A obtención do espectro rovibracional realizouse cos programas TRIATOM. e BOUND para os complexos de tres átomos e con dous métodos basados na rotación dos eixos coordenados para eliminar o acoplamento vibración-rotación para os complexos formados por argón e un derivado do benceno. Dentro desta tese estudiamos unha serie de complexos de tres átomos, que son: He-HX (X = F, Cl, Br, I) e o Ne-HCl. Un complexo de cinco átomos; o He-NH<sub>3</sub>. E unha serie de complexos formados por argón e un derivado do benceno: fluorobenceno-argón e p-difluorobenceno-argón no seu estado fundamental e primeiro estado excitado. A modo de conclusións xerais cabe dicir que nesta tese comprobamos a idoneidade do método CCSD(T) e das bases de Dunningii na determinación de superficies de enerxía potencial intermolecular precisas

---

para complexos de van der Waals. Estas superficies foron utilizadas para a obtención do espectro rovibracional dalgúns destes complexos, estando os niveis rovibracionais calculados en boa concordancia cos determinados experimentalmente. Tamén se puxo de manifesto, especialmente nos complexos de tres átomos, a importancia de realizar un estudo previo para seleccionar o conxunto de funcións base a utilizar, así como a importancia de incluír nestas bases funcións midbond. Os nosos resultados corrixen superficies previas e esperamos que sirvan de guía para futuras investigacións.

**Director/a:** Berta Fernández Rodríguez

**Áreas:** Ciencias Experimentais, Universidade de Santiago de Compostela

- [Investigación](#) [1]
- [Tese de doutoramento](#) [2]

- [Investigación](#)
- [Tese de doutoramento](#)

**Source URL:**

<http://unidadedamullereciencia.plexus.es/ficha/estudio-coupled-cluster-de-potenciales-de-interaccion-en-complejos-de-van-der-waals>

**Ligazóns:**

[1] <http://unidadedamullereciencia.plexus.es/category/taxonomia-temas/investigacion-0>

[2] <http://unidadedamullereciencia.plexus.es/category/taxonomia-temas/tese-de-doutoramento>