

Comparação das contribuições CCFDF para clorofluorometanos, entre os níveis MP2/6-311++G (3p, 3d) e QCISD/ccPVTZ.

Arnaldo F. da Silva Filho¹ (PG)*, Roy E. Bruns¹ (PQ). arnfilho@iqm.unicamp.br

1) Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, CP 6154 13083-970, Campinas, SP, Brasil

Palavras Chave: QTAIM, CCFDF, clorofluorometanos

Introdução

Recentemente modelo Carga – Fluxo de Carga – Fluxo de Dipolo (CCFDF) foi aplicado de maneira bem sucedida para clorofluorometanos, no nível MP2/6-311++G(3p,3d), para elucidar o comportamento eletrônico durante vibrações moleculares¹. O objetivo do trabalho foi aplicar o modelo no nível QCISD/cc-pVTZ, para as mesmas moléculas, para se verificar se existem alterações significativas entre os dois métodos.

Resultados e Discussão

Os cálculos foram feitos, de acordo com a figura 1

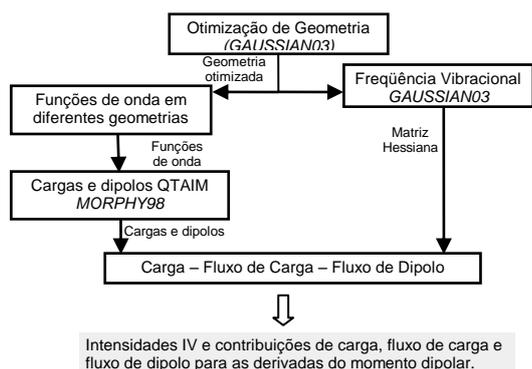


Figura 1. Diagrama dos cálculos CCFDF/QTAIM.

Observa-se na figura 2 que os valores de \bar{p}_α obtidos para ambos os métodos foram parecidos.

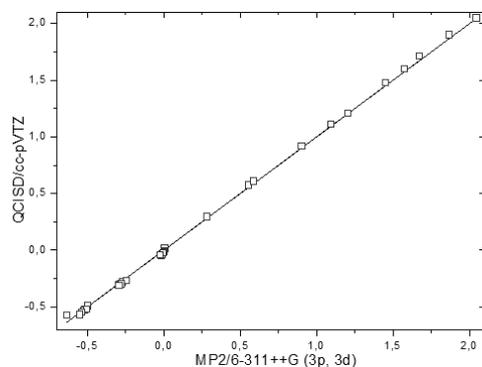


Figura 2. Derivadas médias do momento de dipolo (\bar{p}_α) para os tensores moleculares totais MP2/6-311++G(3p,3d) X QCISD/cc-pVTZ.

Já na figura 3, quando os valores de \bar{p}_α são decompostos em carga, fluxo de carga e fluxo de dipolo é possível notar uma dispersão maior, indicando diferenças entre os métodos, em especial para os pontos correspondentes ao fluxo de dipolo. Comparando as figuras 2 e 3 é possível ver que qualquer diferença observada entre os métodos, quando as contribuições são decompostas, é anulada

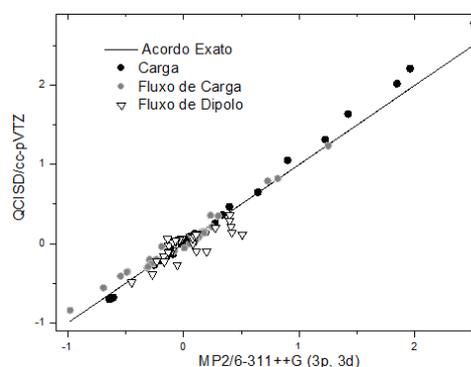


Figura 3. Derivadas médias do momento de dipolo (\bar{p}_α) decompostas em carga, fluxo de carga e fluxo de dipolo MP2/6-311++G(3p,3d) X QCISD/cc-pVTZ.

Conclusões

Como a dispersão observada na decomposição das contribuições das derivadas médias do momento de médio se anula, o programa de cálculo pode estar encontrando dificuldades em calcular essas contribuições. Isto talvez seja porque as contribuições CCFDF são altamente correlacionadas. Porém, diferenças entre os dois métodos não devem ser ignoradas e serão alvo de estudos posteriores.

Agradecimentos

CAPES e Fapesp.

¹Viçoso, J.; Haiduke, R.L.A.; Bruns, R.E. *J. Phys. Chem. A*. **2006**, 110 4839-4845