

## Estudo teórico de moléculas

**Gustavo X.A. Petronilo (IC)<sup>1</sup>, Angelo M. Maniero (PQ)<sup>1\*</sup>**

Universidade Federal do Oeste da Bahia, <sup>1</sup>Centro das Ciências Exatas e das Tecnologias, CEP 47810-059, Barreiras, Bahia, Brasil.

E-mail: [angelo.maniero@ufob.edu.br](mailto:angelo.maniero@ufob.edu.br)

Palavras Chave: *Hartree-Fock*, funcional densidade, DFT

### Abstract

*The molecular physics seeks to explain the physical and chemical properties of molecules. Which includes the Coulomb's law, kinetic energy, potential energy, Pauli exclusion principle, and others to explain and predict observations. In our study we consider the wave function of the structure to an operator of many electrons (e.g. Hamiltonian) and discuss its shape. We start with the time independent Schrödinger equation and introduced the approach of Born-Oppenheimer then the approach of Hartree-Fock [1], where it is used determinants of Slater for the construction of the orbital that will give less power, using this variational method. We study the Hartree-Fock method restricted to open layers and closed as a first approximation. Soon after, we left for methods, more efficient, called Post-Hartree-Fock, which saw the configuration interaction methods, theory of the disturbance of many bodies and the density functional theory (DFT) [2-5]. Also approach the methods of Quantum Monte Carlo, the computational methods for solving these problems.*

### Introdução

A física molecular busca explicar as propriedades físicas e químicas das moléculas. A qual inclui a lei de Coulomb, Energia Cinética, Energia Potencial, princípio de exclusão de Pauli e muito outros para explicar e prever observações. Em nosso estudo nós consideramos a estrutura da função de onda de um operador de muitos elétrons (e.g., Hamiltoniano) e discutimos a sua forma. Nós começamos com a equação Schrödinger independente do tempo e introduzimos a aproximação de Born-Oppenheimer em seguida a aproximação de Hartree-Fock, onde se é utilizado determinantes de Slater para a construção do orbital que dará a menor energia, utilizando para isso métodos variacionais. Nós estudamos o método de Hartree-Fock restrito de camadas abertas e fechadas como uma primeira aproximação. Logo depois, partimos para métodos, mais eficientes, chamados de Pós-Hartree-Fock, o qual vimos os métodos de interação de configuração, a teoria de perturbações de muitos corpos e a Teoria do Funcional de Densidade (DFT) [2-5]. Abordamos também os métodos de Monte Carlo Quântico, métodos computacionais para a resolução desses problemas.

### Material e Métodos

Os materiais utilizados foram livros e periódicos. Os quais foram utilizados para elaborar seminários dirigidos pelo bolsista.

### Conclusões

Nestas notas discutimos sobre teoria de perturbações de muitos corpos e depois sobre a teoria do funcional da densidade, abordamos os cálculos que achamos mais importantes. Tentamos tornar tratamento formal o mais simples possível. Essas teorias são aplicadas em campos como Física Molecular e do Estado Sólido; em Ciências dos Materiais; em Química; em Bioquímica; em Geologia e em Astrofísica. Depois disso passamos um pouco sobre o método computacional de Monte Carlo que é a ferramenta utilizada para os cálculos apresentados nestas notas.

### Referências

- [1] A. Szabo, N.S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory, N.Y. Mineola, Dover Publications, (1996).
- [2] A.C. Pedroza, Teoria do Funcional de Densidade: Uma Possível Solução para o Problema de Muitos Elétrons da Mecânica Quântica, Physicae Organum: Revista dos Estudantes de Física da Universidade de Brasília 2.1 (2016).
- [3] J.D.M. Vianna, A. Fazzio, S. Canuto, Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos - Simulação Computacional, Editora Livraria da Física, São Paulo (2004).
- [4] P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev. B 136 (1964) B864.
- [5] W. Kohn, L.J. Sham, Phys. Rev. 140 (1965) A1133.