

Uma sonda computacional para campos elétricos de moléculas grandes

Paulo Fernando Gomes Velloso^{*1}, Leonardo Gabriel Diniz^{†2}, José Rachid Mohallem^{*3}

^{*} Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Minas Gerais, Brasil

[†] Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, Belo Horizonte, Minas Gerais, Brasil

Synopsis Pretendemos desenvolver uma técnica computacional para determinar campos elétricos nas proximidades de moléculas usando uma sonda isotópica.

Campos e potenciais eletrostáticos desempenham um papel fundamental na interpretação de propriedades moleculares e de matéria condensada [1]. É difícil determinar os campos elétricos criados pelas moléculas, porque apesar dos pacotes de química quântica serem capazes de resolver a equação de Poisson após o cálculo da densidade eletrônica, o alto custo computacional é um problema.

A possibilidade explorada nesse trabalho é a de determinar os campos elétricos usando uma “sonda” local. Os efeitos da ação do campo sobre tal sonda, obtidos através do nosso pacote ISOTOPE [2] para o sistema molécula + sonda, devem permitir a avaliação local do campo elétrico uma vez conhecida a relação da energia do sistema com o campo.

Idealmente, a sonda seria um sistema com a menor influência possível sobre a molécula cujo campo queremos determinar. Isotopólogos de

moléculas pequenas e apolares, que apresentam minúsculos momentos de dipolo permanente [3] são ótimos candidatos.

Testes iniciais com a molécula LiH e uma sonda tipo HD com massas nucleares fictícias produziu resultados animadores.

Agradecimentos

Agradecemos o apoio das agências de fomento CNPq e **FAPEMIG**.

Referências

- [1] J. F. Rico, R. Lopez, I. Ema e G. Ramírez 2004 *J. Comp. Chem.* **25**, 1347
- [2] C. P. Gonçalves e J. R. Mohallem 2004 *J. Comp. Chem.* **25**, 1736
- [3] A. F. C. Arapiraca, D. Jonsson e J. R. Mohallem 2011 *J. Chem. Phys.* **135**, 244313

¹E-mail: paulofgo@fisica.ufmg.br

²E-mail: leogabriel@deii.cefetmg.br

³E-mail: rachid@fisica.ufmg.br