



XXVI Comunicaciones Científicas y Tecnológicas

Orden Poster: CE-010 (ID: 1934)

Autor: Aucar, Juan Jose

Título: Efectos relativistas sobre el gradiente de campo eléctrico con el formalismo LRESC

Director: Maldonado, Alejandro Fabián

Palabras clave: GRADIENTE DE CAMPO ELÉCTRICO, FORMALISMO LRESC, EFECTOS RELATIVISTAS

Área de Beca: Cs. Naturales Y Exactas

Tipo Beca: Conicet

Periodo: 01/04/2019 al 31/03/2024

Lugar de trabajo: Imit - Inst. De Modelado E Innovación Tecnológica

Proyecto: (PICT-2016-2936) Teorías y modelos novedosos para analizar y describir con máxima precisión propiedades magnéticas de sistemas atómicos y moleculares de tamaño pequeño y mediano.

Resumen:

Al trabajar con sistemas moleculares que contienen átomos pesados es imprescindible incluir los efectos relativistas para describir correctamente sus propiedades [1]. La magnitud de dichos efectos se puede obtener a partir de la aplicación de distintos modelos. En los últimos años hubo un incremento en el interés por desarrollar modelos más completos y precisos, a partir del cual se formularon varios esquemas denominados semirelativistas, cuasirelativistas y perturbativos, como así también esquemas basados en la teoría de funcionales de la densidad (DFT) de cuatro componentes.

En este trabajo se estudian los efectos relativistas en el gradiente de campo eléctrico (EFG), el cual es una prueba sensitiva de la distribución de carga local y del número y tipo de enlaces de un átomo. Los sistemas moleculares elegidos para el estudio del EFG son los di-halógenos XY ($X, Y = F, Cl, Br, I, At$), empleando el formalismo Linear Response Elimination of the Small Component (LRESC) [2], el cual permite obtener correcciones relativistas, y cuya aplicación a esta propiedad es sumamente reciente [3]. Los resultados se comparan con valores relativistas de cuatro componentes a nivel Dirac-Hartree-Fock (4c-DHF).

Los valores obtenidos con LRESC son próximos a los valores 4c-DHF, incluso para los sistemas más pesados, con diferencias del orden del 5%, permitiendo estudiar los mecanismos electrónicos responsables de los efectos relativistas en los sistemas estudiados. La corrección relativista más importante dada por el formalismo LRESC es la corrección Δ^{Mv} , que representa el 80% del valor no relativista en sistemas pesados. De esta manera, el formalismo LRESC provee un conocimiento significativo basado en operadores no relativistas bien conocidos. Los mecanismos electrónicos subyacentes a los efectos relativistas aparecen con claridad al aplicar el formalismo LRESC al EFG y puede ser analizada cada contribución por separado, o bien de manera global, para cada conjunto de moléculas.

BIBLIOGRAFÍA:

- [1] L. Visscher, T. Enevoldsen, T. Saue, and J. Oddershede. *J. Chem. Phys.*, 109:9677, 1998.
- [2] J. I. Melo, M. C. Ruiz de Azúa, C. G. Giribet, G. A. Aucar, and R. H. Romero. *J. Chem. Phys.*, 118:471, 2003.
- [3] J. I. Melo and A. F. Maldonado. *Int. J. Quantum Chem.*, 119(15):e25935, 2019.