

P 243

Efectos relativistas y de la forma nuclear sobre los parámetros espectroscópicos de la RMN

Giménez C¹, Maldonado A², Aucar G³^{1 2 3} *IMIT-CONICET-UNNE*

En este trabajo se presenta el estudio de la dependencia de los parámetros espectroscópicos de la RMN, J y σ , con: i) diferentes bases de funciones gaussianas; ii) el valor de la velocidad de la luz (lo que diferencia al régimen relativista del no relativista); iii) la correlación electrónica para sistemas moleculares que contienen átomos pesados como el bromo y el yodo y iv) el modelo nuclear: puntual o gaussiano.

Al utilizar bases de funciones gaussianas típicas en cálculos de propiedades magnéticas moleculares dentro del régimen no relativista, se encontró que con las mismas no se reproduce adecuadamente el espectro de niveles de energía negativa; es decir, la precisión del espectro no es el adecuado para la reproducción de propiedades magnéticas en el régimen relativista. Se hace necesario entonces partir de bases diseñadas especialmente para el cálculo de energías dentro del régimen relativista, como la Dyall-cVTZ, y luego reoptimizarlas. A partir de este estudio se sugiere un esquema de optimización. Al variar el valor de la velocidad de la luz en el código DIRAC, que permite el cálculo de propiedades moleculares en un marco completamente relativista, se observa que los valores de los parámetros J y σ son muy poco dependientes del modelo nuclear en el régimen no relativista, y son mucho más dependientes en el régimen relativista. El rango de variación de los parámetros de la RMN en este último régimen es comparable con los mínimos valores detectables en forma experimental. Sin embargo la energía electrónica no varía apreciablemente (una parte en 100.000) en ambos regímenes. Esto indica que los parámetros espectroscópicos de la RMN podrían informar sobre características de forma de la estructura nuclear.

Al presente no existen códigos computacionales que incluyan ambos efectos simultáneamente en estudios completamente relativistas.