

# Geração de Conjuntos de Bases Gaussianas para átomos da primeira série dos metais de transição (Sc-Zn).

\*Ana C. Mora<sup>1</sup> (PG), Albérico B. F. Da Silva<sup>1</sup> (PQ).

<sup>1</sup>Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, Brasil.

\*anacmora@gmail.com

Palavras Chave: ATOM-SCF, COORDENADA GERADORA, METAIS TRANSIÇÃO.

## Introdução

Em estudos de propriedades eletrônicas de sistemas atômicos e moleculares em química computacional, os sistemas são descritos por meio de conjuntos de funções de base, é por isso que o desenvolvimento de conjuntos de base de alta qualidade é realizado por vários grupos de pesquisa. O Método da Coordenada Geradora (MCG) juntamente com a técnica de Discretização Integral Polinomial (DIP)<sup>1</sup>, partindo do pressuposto de que uma melhor descrição da camada de valência reduzirá o número de funções de polarização a serem utilizadas diminuindo assim o custo computacional, tem sido utilizado na geração de conjuntos de base para átomos da primeira<sup>2</sup> e segunda<sup>3</sup> filas. O método MCG-DIP mostrou-se eficaz quando comparados com valores obtidos com conjuntos de base convencionais como são as base de Dunning e de Pople.

Neste trabalho são apresentados resultados preliminares da geração funções de base para os átomos da primeira serie dos metais de transição (Sc – Zn) utilizando o MCG-DIP.

## Resultados e Discussão

Os resultados apresentados foram realizados utilizando o programa ATOM-SCF, modificado o qual está baseado no MCG-PDI.

O primeiro passo foi determinar o tamanho das bases para cada átomo, o numero de funções primitivas para representar os orbitais s, p e d foram parametrizados em 25s20p15d para todos os átomos. O parâmetro utilizado na determinação do tamanho das bases foi a energia eletrônica Hartree-Fock (HF). Os resultados são apresentados na tabela 1.

O passo seguinte foi realizar a etapa de contração e determinar a qualidade das bases. Os resultados são apresentados na tabela 2.

No momento estão sendo realizados testes moleculares que ajudaram a determinar o tipo de polarização das bases.

**Tabela 1.** Comparação dos valores de Energias HF numérico com os valores obtidos com o conjunto de base gerado no ATOM-SCF.

ÁTOMO	E HF NUMÉRICO <sup>4</sup> (Hartree)	E ATOM-SCF (Hartree)	ΔE
Sc	-759,735718	-759,735498	-0,000220
Ti	-848,405997	-848,405936	-0,000061
V	-942,884338	-942,884042	-0,000296
Cr	-1043,356381	-1043,356333	-0,000048
Mn	-1149,866256	-1149,865865	-0,000391
Fe	-1262,443670	-1262,443597	-0,000073
Co	-1381,414550	-1381,413891	-0,000659
Ni	-1506,870910	-1506,870789	-0,000121
Cu	-1638,950080	-1638,949585	-0,000495
Zn	-1777,848120	-1777,847339	-0,000781

E= energia. O valor de ΔE foi calculado como: E HF numérico - E ATOM-SCF)

**Tabela 2.** Funções contraídas para cada tipo de conjunto de base obtido.

QUALIDADE DA BASE	NÚMERO DE FUNÇÕES CONTRAÍDAS
6Z	9s7p6d
7Z	10s8p7d

## Conclusões

Os resultados obtidos até o momento mostram mais uma vez que o Método MCG-DIP é eficaz para a geração de conjuntos de base para átomos.

## Agradecimentos

CNPQ, IQSC-USP.

<sup>1</sup>Barbosa, R.C. e DA Silva A. B. F. *Molecular Physics*, **2003**, *101*, 1073.

<sup>2</sup>Junior, M. C. Geração de conjuntos de base Gaussianos contraídos e polarizados para átomos da primeira filada tabela periódica para aplicação em cálculos ab initio de propriedades atômicas e moleculares. Tese, IQSC, São Paulo, **2005**.

<sup>3</sup>Ribeiro, G. A. Geração, Contração e Polarização de Bases Gaussianas para Cálculos Quânticos de Átomos e Moléculas. Tese, IQSC, São Paulo, **2013**.

<sup>4</sup>Castro, E. V. R. e Jorge, F. E. J. *Chem. Phys*, **1998**, *108*, 5225.