

Geração de bases atômicas de Hidrogênio a Kriptônio aplicando-se nova proposta de discretização das equações Griffin-Wheeler-Hartree-Fock.

Ricardo Celeste¹ (PQ)*, Moacyr Comar Júnior² (PG) e Albérico Borges Ferreira da Silva² (PQ)

(1)Departamento de Química - UNICENTRO (rceleste@unicentro.br), (2) Instituto de Química de São Carlos - USP

Palavras Chave: Coordenada Geradora Hartree-Fock, Bases Gaussianas, Bases Atômicas.

Introdução

Em 1986, uma versão integral das equações de Griffin-Wheeler-Hartree-Fock (GW-HF) foi apresentada na literatura¹, inspirada no Método da Coordenada Geradora (MCG), introduzido por Griffin e Wheeler nos anos 1950². A versão integral das equações de Hartree-Fock foi denominada de Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock (MCG-HF) e uma de suas primeiras aplicações foi na geração de bases atômicas universais.

Recentemente, foi proposto por Barbosa e da Silva³ uma modificação no modo de se obter as bases do MCG-HF, gerando funções de base Gaussianas acuradas tão boas ou melhores quanto aquelas até então obtidas, com a vantagem de serem mais compactas e mais eficientes.

Esta modificação no esquema de escolha das funções de base está implementada no pacote computacional denominado **GENBASIS** de uso do grupo de Química Quântica do IQSC-USP.

Neste trabalho, aplica-se este novo esquema de discretização das equações GW-HF na obtenção de bases gaussianas atômicas, via MCG-HF, a serem usadas em cálculos de atômicos e moleculares. Este trabalho consiste de três partes distintas: a) obtenção das bases atômicas estendidas; b) contração das bases atômicas estendidas; c) aplicação em moléculas.

Resultados e Discussão

Neste trabalho, apresenta-se resultados das energias para os átomos de Hidrogênio a Kriptônio e estas são relativas às etapas a e b, mencionadas na introdução. Tem-se como objetivo principal aplicar as duas primeiras etapas aos átomos de Hidrogênio a Bário e a última etapa em um conjunto de moléculas a serem escolhidas.

Nossas bases conduzem a diferenças de energia, comparadas aos resultados Hartree-Fock Numérico⁴, menores que 1 mhartree.

Os cálculos foram realizados utilizando o pacote computacional **GENBASIS** do Grupo de Química Quântica do IQSC-USP, instalado em uma *workstation* IBM-RISC-6000 do Centro de Informática de São Carlos-USP.

Conclusões

Diante dos excelentes resultados obtidos das energias para os elementos Hidrogênio a Kriptônio, podemos afirmar que estes conjuntos de funções de bases são fortes candidatos a serem usados em cálculos moleculares.

Agradecimentos

Fundação Araucária, CAPES, CNPq e Universidade Estadual do Centro-Oeste-UNICENTRO.

¹ Mohallem J.R., Dreizler, R. M. e Trsic, M. Int. J. Quant. Chem. Symp, **1986**, 20, 45.

² Griffin, J. J. e Wheeler, J. A. Phys. Rev., **1957**, 108, 311.

³ Barbosa, R. C. e Da Silva, A B. F., Mol. Phys., **2003**, 101, 1073.

⁴ Bunge, C. F., Barrientos, J. A., Bunge, A. V. e Cogordan, J. A., Phys. Rev. A, **1992**, 46, 3691.

⁵ Woon, D. E. e Dunning Jr., T. H., J. Chem. Phys., **1993**, 98, 1358; Kendall, R. A., Dunning Jr., T. H. e Harrison, R. J., J. Chem. Phys. **1992**, 96, 6796; Dunning Jr., T. H., J. Chem. Phys. **1989**, 90, 1007.