

# Polarização de funções de base Gaussianas desenvolvidas pelo Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock Polinomial.

Milena Palhares Maringolo<sup>1</sup>(PG)\* e Albérico Borges Ferreira da Silva<sup>1</sup>(PQ)

[maringolomp@iqsc.usp.br](mailto:maringolomp@iqsc.usp.br)

<sup>1</sup>Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, CP 780, 13560-970 São Carlos – SP, Brasil

Palavras Chave: Polarização, Funções de Base, Conjuntos de Base.

## Introdução

O Método da Coordenada Geradora Hartree Fock polinomial (pMCG-HF), desenvolvido por R.C. Barbosa e A.B.F. da Silva<sup>1</sup>, é uma ferramenta matemática valiosa para gerar funções de base Gaussianas de alta qualidade. A qualidade dessas funções de base está diretamente relacionada à dependência da combinação de expoentes e funções orbitais que elas contêm. Para obter estes expoentes, de forma variacional, é muito custoso computacionalmente, por isso uma boa alternativa é selecionar expoentes da própria função de base para polarizá-las. A polarização de funções de base é um processo que consiste em adicionar expoente(s) a uma função orbital com o número quântico principal de maior momento angular ( $\ell$ ). Como bons valores de energia em moléculas são obtidos quando as funções de base são polarizadas, o objetivo deste trabalho é obter uma forma de polarização, esquivando-se do método variacional, para facilitar a geração de funções de base de alta qualidade, poupando esforço computacional e tempo.

## Resultados e Discussão

A seleção de expoentes da própria base primitiva<sup>2</sup> de cada átomo foi feita combinando os expoentes localizados na mesma posição<sup>3</sup>. Os cálculos feitos para átomos mostraram que a melhor forma de combinação de expoentes para a polarização é selecionando os expoentes “s” e os expoentes “p” apresentados nas tabelas a seguir:

**Tabela 1.** Expoentes selecionados da base primitiva do átomo de carbono

	S2	S3	P2	P3
1d	1,16	1,16	1,3	1,3
2d	0,58	0,58	0,5	0,5
1f	0,58	1,16	0,5	1,3

**Tabela 2.** Expoentes selecionados da base primitiva do átomo de oxigênio

	S2	S3	P2	P3
1d	2,3	2,3	2,06	2,06
2d	0,9	0,9	0,86	0,86
1f	0,9	2,3	0,86	2,06

Utilizando estas polarizações em conjuntos de base para os cálculos de propriedades eletrônicas de moléculas, por exemplo, a molécula de monóxido de carbono (CO) foi calculada com o funcional híbrido B3LYP da teoria do funcional de densidade (DFT), obtendo-se os seguintes resultados apresentados na tabela a seguir:

**Tabela 3.** Resultados de distância entre átomos (Å), energia (Hartree) e frequência vibracional ( $\text{cm}^{-1}$ ) da molécula de monóxido de carbono

	S2	S3	P2	P3
Distância	1,1252	1,1242	1,1251	1,1239
Energia	-113,3659	-113,3669	-113,3665	-113,3675
Frequência	2.210	2.210	2.215	2.210

Sabendo que os valores experimentais de distância e frequência vibracional são: 1,1283(Å) e 2170( $\text{cm}^{-1}$ ) e comparando-os com os valores da Tabela 3, nada podemos afirmar sobre qual tipo de polarização seria melhor devido os resultados não terem uma diferença representativa, porém os valores de energia induzem que a melhor opção de escolha das funções de polarização seja como a do tipo P3, por apresentar valores de energia por volta de 0,001Hartree menor do que as outras, sendo correspondente a 2,626 KJ/mol.

## Conclusões

Conclui se que as funções de polarização com combinações feitas do tipo P3 são uma boa alternativa a ser aplicada nos conjuntos de base desenvolvidos pelo Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock Polinomial.

## Agradecimentos

Os autores agradecem ao Instituto de Química de São Carlos/USP e ao CNPq pelo apoio.

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

<sup>2</sup>Comar Jr, Moacyr; *Teses USP* **2005**

<sup>3</sup>Maringolo, Milena P.; *Teses USP* **2010**