

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE QUÍMICA DE SÃO CARLOS

**UMA REGRA PARA A POLARIZAÇÃO DE
FUNÇÕES DE BASE GERADAS PELO MÉTODO
DA COORDENADA GERADORA**

Milena Palhares Maringolo

Dissertação apresentada ao
Instituto de Química de São
Carlos, da Universidade de
São Paulo para obtenção do
Título de Mestre em Ciências
(Físico-Química)

Orientador: Prof. Dr. Albérico B.F. da Silva

São Carlos

2010

Este exemplar foi revisado e alterado em relação à versão original, sob exclusiva responsabilidade do autor.

São Carlos, 20/12/2010

Milena Palhares Maringolo

Dedico esta dissertação de mestrado a aqueles que não mediram
esforços para tornar meus sonhos em realidade: meus pais
Lia e Domingos e minha vovó Elza (in memoriam)

Agradecimentos

- Ao Prof. Dr. Albérico pela orientação (algumas vezes, sobre a vida cotidiana), apoio, paciência e amizade;
- Ao Instituto de Química de São Carlos-USP principalmente à Silvia, à Andréa, ao Ângelo, ao Irineu, ao Eduardo, à Bernadete e à Eliana pelas ajudas sempre bem humoradas;
- À CNPQ pela bolsa concebida;
- A todos da Química Estrutural, em especial, às professoras Teca e Regina para as quais não tenho palavras para expressar tamanho carinho e respeito, ao professor Haiduke, ao Chicão e ao Josmar pela colaboração na minha aprendizagem; ao Rommel, à Ângela, à Vânia, ao Joel, à Shirley, à Cris, ao Luiz e ao Rafael pela companhia e discussões dos vários assuntos com pontos de vista tão diferentes, que tanto nos uniram;
- A minha irmã Fernanda, ao meu irmão Vitor, a minha sobrinha Lara, à tia Taís, à Mariana, ao Gabriel, à Maria Luiza e ao meu afilhado Felipe pela alegria e esperança que me proporcionam;
- A minha família, especialmente à vó Nair, ao tio Orlando, ao tio César, à tia Lurdinha, à tia Lála, ao Fabinho e à tia Cida pelos abraços, palavras de carinho, pelos ensinamentos, pela calma e conforto;
- As minhas amigas de infância Dina Frujuelle e Suze Máximo, aos amigos que fiz aqui em São Carlos e que a distância não esmorece: Rafa Freitas, Dani Lelis, Gui Miziara e Mario Lizier;
- Ao Flávio pelo amor, carinho e respeito em toda esta jornada;
- A Deus por me disponibilizar todos estes anjos para tornar a minha vida mais feliz.

“Só aqueles que têm paciência para fazer coisas simples com perfeição é que irão adquirir habilidade para fazer coisas difíceis com facilidade”

Johann Christoph Von Schiller

RESUMO

O Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock Polinomial (pMCG-HF), desenvolvido por R.C. Barbosa e A.B.F. da Silva [1], é uma ferramenta matemática valiosa que permite gerar funções de base (também conhecidas como conjuntos de base). As funções de base geradas por este método têm um bom comportamento e são capazes de calcular valores precisos de propriedades eletrônicas moleculares. Porém, depois de gerar funções de base do hidrogênio até o flúor [2], fez-se necessário a adição de expoentes à função de base, correspondentes a cada átomo, para melhor adaptação à realização dos cálculos moleculares. Estas funções adicionais são o que chamamos de funções de polarização. A adição de funções de polarização, através de otimização computacional, é muito custosa, deste modo o desenvolvimento de uma regra de polarização para se esquivar desta otimização é de grande importância e por isso se transforma na beleza e no objetivo deste trabalho. Portanto, nesta dissertação, estudar-se-á um procedimento para escolher funções de polarização que reduza drasticamente o tempo computacional, no sentido de permitir uma seleção, mais simples, de expoentes da própria função de base primitiva para serem usadas nas funções de polarização p, d, f, g, etc. para a obtenção de propriedades moleculares calculadas através de métodos químico-quânticos

ABSTRACT

The polynomial generate coordinate method pGCM developed by R.C. Barbosa and A.B.F. da Silva [1] is an remarkable mathematic tool for the generation of basis functions (also known as basis sets). The basis sets generated from this method have a good behavior and are able to produce accurate values for electronic molecular properties. In fact, after generating a basis set [2] we need to add a set of exponent functions in order to better adequate a basis set to perform molecular calculations. These sets of additional functions are called polarizations functions. This work provides a methodology where the polarization functions are obtained from the initial basis set (the primitive set) without optimizing them separately by using optimization algorithms that are, computationally speaking, very costly. This procedure reduces drastically the computational time used to find polarization functions to be used in molecular quantum chemical calculations. Our methodology permits to choose the polarization functions directly from the primitive orbital exponents of each atomic symmetry s, p, d, f, etc. in a very simple manner. The finding of polarization functions using our methodology was performed with several quantum chemical methods.

Lista de Tabelas

Tabela 1: Expoentes “s” e “p” da função de base do boro	39
Tabela 2: Combinações de expoentes de polarização “s” para o átomo de boro	42
Tabela 3: Energia (Hartree) obtida em diferentes cálculos quânticos para cada combinação de expoentes de polarização “s” do átomo de boro	42
Tabela 4: Combinações de expoentes de polarização “s” para o átomo de carbono	43
Tabela 5: Energia (Hartree) obtida em diferentes cálculos quânticos para cada combinação de expoentes de polarização “s” do átomo de carbono	43
Tabela 6: Combinações de expoentes de polarização “s” para o átomo de nitrogênio	43
Tabela 7: Energia (Hartree) obtida em diferentes cálculos quânticos para cada combinação de expoentes de polarização “s” do átomo de nitrogênio	44
Tabela 8: Combinações de expoentes de polarização “s” para o átomo de oxigênio	44
Tabela 9: Energia (Hartree) obtida em diferentes cálculos quânticos para cada combinação de expoentes de polarização “s” do átomo de oxigênio	44
Tabela 10: Combinações de expoentes de polarização “s” para o átomo de flúor	45
Tabela 11: Energia (Hartree) obtida em diferentes cálculos quânticos para cada combinação de expoentes de polarização “s” do átomo de flúor	45
Tabela 12: Combinações de expoentes de polarização “p” para o átomo de boro	46
Tabela 13: Energia (Hartree) obtida em diferentes cálculos quânticos para cada combinação de expoentes de polarização “p” do átomo de boro	47
Tabela 14: Combinações de expoentes de polarização “p” para o átomo de carbono	47
Tabela 15: Energia (Hartree) obtida em diferentes cálculos quânticos para cada combinação de expoentes de polarização “p” do átomo de carbono	47
Tabela 16: Combinações de expoentes de polarização “p” para o átomo de nitrogênio	48

Tabela 17: Energia (Hartree) obtida em diferentes cálculos quânticos para cada combinação de expoentes de polarização “p” do átomo de nitrogênio	48
Tabela 18: Combinações de expoentes de polarização “p” para o átomo de oxigênio	48
Tabela 19: Energia (Hartree) obtida em diferentes cálculos quânticos para cada combinação de expoentes de polarização “p” do átomo de oxigênio	49
Tabela 20: Combinações de expoentes de polarização “p” para o átomo de flúor	49
Tabela 21: Energia (Hartree) obtida em diferentes cálculos quânticos para cada combinação de expoentes de polarização “p” do átomo de flúor	49
Tabela 22: Expoentes de polarização obtidos através do pMCG-HF(2df).....	51
Tabela 23: Energia (Hartree) obtida em diferentes cálculos quânticos para cada expoente de polarização do pMCG-HF(2df)	51
Tabela 24 Comprimento de ligação (Å) de nitrogênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm ⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando B3LYP para a molécula de N ₂	52
Tabela 25: Comprimento de ligação (Å) de nitrogênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm ⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando MP2 para a molécula de N ₂	52
Tabela 26: Comprimento de ligação (Å) de nitrogênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm ⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando CCSD para a molécula de N ₂	52
Tabela 27: Comprimento de ligação (Å) de nitrogênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm ⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando CISD para a molécula de N ₂	53
Tabela 28: Comprimento de ligação (Å) de oxigênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm ⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando B3LYP para a molécula de O ₂	53
Tabela 29: Comprimento de ligação (Å) de oxigênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm ⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando MP2 para a molécula de O ₂	53
Tabela 30: Comprimento de ligação (Å) de oxigênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm ⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando CCSD para a molécula de O ₂	54

Tabela 31: Comprimento de ligação (Å) de oxigênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm ⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando MP2 para a molécula de O ₂	54
Tabela 32: Comprimento de ligação (Å) de flúor, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm ⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando B3LYP para a molécula de F ₂	54
Tabela 33: Comprimento de ligação (Å) de flúor, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm ⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando MP2 para a molécula de F ₂	55
Tabela 34: Comprimento de ligação (Å) de flúor, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm ⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando CCSD para a molécula de F ₂	55
Tabela 35: Comprimento de ligação (Å) de flúor, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm ⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando CISD para a molécula de F ₂	55
Tabela 36: Comprimento de ligação (Å) de carbono e oxigênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm ⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando B3LYP para a molécula de CO	56
Tabela 37: Comprimento de ligação (Å) de carbono e oxigênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm ⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando MP2 para a molécula de CO.....	56
Tabela 38: Comprimento de ligação (Å) de carbono e oxigênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm ⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando MP2 para a molécula de CO.....	56
Tabela 39: Comprimento de ligação (Å) de carbono e oxigênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm ⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando CISD para a molécula de CO.....	57
Tabela 40: Comprimento de ligação (Å) de nitrogênio e oxigênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm ⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando B3LYP para a molécula de NO	57
Tabela 41: Comprimento de ligação (Å) de nitrogênio e oxigênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm ⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando MP2 para a molécula de NO.....	57

Tabela 42: Comprimento de ligação (Å) de nitrogênio e oxigênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm ⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando CCSD para a molécula de NO	58
Tabela 43: Comprimento de ligação (Å) de nitrogênio e oxigênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm ⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando MP2 para a molécula de NO.....	58
Tabela 44: Comprimento de ligação (Å) de boro e flúor, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm ⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando B3LYP para a molécula de BF ₃	59
Tabela 45: Comprimento de ligação (Å) de boro e flúor, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm ⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando MP2 para a molécula de BF ₃	59
<i>Tabela 46: Comprimento de ligação (Å) de boro e flúor, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando CCSD para a molécula de BF₃.....</i>	<i>60</i>
<i>Tabela 47: Comprimento de ligação (Å) de boro e flúor, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando CISD para a molécula de BF₃.....</i>	<i>60</i>

Sumário

Lista de Tabelas	viii
Introdução	13
Capítulo I: Funções de Onda	15
Funções de Base	17
Funções de Polarização	20
Funções Difusas	24
Capítulo II: O Método da Coordenada Geradora	26
O desenvolvimento do Método da Coordenada Geradora (MCG)	28
A Equação de Griffin-Hill-Wheeler (GHW)	31
O Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock	33
A Discretização Integral e a Troca de Rótulos	35
Capítulo III: Materiais e Método	39
Capítulo IV: Resultados e discussão	41
Capítulo V: Conclusões	61
APÊNDICE	68

Introdução

A Química Teórica Moderna, também conhecida como Química Computacional abrange a necessidade de representar a estrutura da matéria em nível molecular com o desenvolvimento da modelagem molecular. A aplicação de modelos teóricos para representar e manipular a estrutura de moléculas, estudar reações químicas e estabelecer relações entre a estrutura e propriedades da matéria são de extrema importância para obter informações biológicas [3-6] benéficas à vida.

Contudo, o uso da Modelagem Molecular carece conhecer métodos adequados de cálculos quânticos, os quais necessitam de funções de base (Capítulo I) que o Método da Coordenada Geradora Polinomial (Capítulo II) pôde aperfeiçoar ao longo dos anos.

As funções de base [2], aqui estudadas, foram geradas através do Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock polinomial (pMCG-HF) desenvolvido pelo grupo de Química Quântica do Instituto de Química de São Carlos e apresentada por R. C. Barbosa e A. B. F. da Silva em 2003 [1].

Bons valores de energia em moléculas são obtidos quando as funções de base são polarizadas e sabendo que conseguir expoentes de polarização para uma dada função de base através de otimização computacional é muito custoso, principalmente à medida que o número atômico (Z) cresce, vem a idéia de encontrar uma regra para generalizar a escolha desses expoentes de polarização para qualquer átomo, esquivando-se do processo de otimização.

Portanto, o objetivo deste trabalho é obter uma alternativa para gerar funções de base polarizadas de alta qualidade e com baixo custo computacional para calcular propriedades eletrônicas de átomos e moléculas.

Capítulo I: Funções de Onda

A Mecânica Quântica busca constantemente alguma forma de melhor resolver a equação de Shrödinger:

$$\hat{H}\Psi \cong E\Psi \quad (\text{I.1})$$

onde \hat{H} representa o operador hamiltoniano que quando aplicado sobre a função de onda, Ψ , definida como autofunção, tem como resultado seu autovalor E , que por sua vez, dependendo da Ψ escolhida, E representará a energia mínima total do sistema.

A dificuldade de resolver a *equação (I.1)* está relacionada à escolha de uma função de onda adequada. Para o átomo de hidrogênio temos uma função de onda que resolve a *equação (I.1)* exatamente, caracterizada da seguinte forma:

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (\text{I.2})$$

onde $R_{n,l}(r)$ contém a dependência radial da função de onda $\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)$ apresentada como:

$$R_{n,l}(r) = N_{n,l} \left(\frac{2r}{n} \right)^l \exp\left(-r/n\right) L_{n-l}^{2l+1}\left(2r/n\right) \quad (\text{I.3})$$

onde $N_{n,l}$ é um fator de normalização e $L_{n+l}^{2l+1}(2r/n)$ representa o polinômio associado de Laguerre de argumento $2r/n$:

$$L_{n+l}^{2l+1}(2r/n) = \sum_{k=0}^{n-l-1} (-1)^{k+1} \frac{\{(n+l)!\}^2}{(n-l-1-k)!(2l+1+k)!k!} (2r/n)^k \quad (\text{I.4})$$

e $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ contém a dependência angular da mesma função de onda, sendo conhecidas por harmônicos esféricos e é expressa da seguinte forma:

$$Y(\theta, \phi) = N_{l,m} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (\text{I.5})$$

onde $N_{l,m}$ é um fator de normalização e $P_l^m(\cos \theta)$ é o polinômio associado de Legendre:

$$P_l^{|m|}(\cos \theta) = (1 - \cos^2 \theta)^{|m|/2} \frac{\partial^{|m|}}{\partial \cos^{|m|} \theta} P_l(\cos \theta) \quad (\text{I.6})$$

$$P_l(\cos \theta) = \frac{1}{2^l l!} \frac{\partial^l (\cos^2 \theta - 1)^l}{\partial \cos^l \theta}, \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (\text{I.7})$$

Contudo, o termo com dependência angular possui solução analítica exata e por isso o termo radial fica sujeito a ajustes matemáticos denominados como Funções de Base ou Conjuntos de Base [7-9] devido à complexidade do polinômio associado de Laguerre.

Funções de Base

A função de base é um conjunto de funções matemáticas convenientemente usadas para descrever o termo radial de uma função de onda para resolver a equação de Schrödinger *equação (1.1)*. Elas são combinações lineares e foram originadas do Princípio Variacional, da Aproximação de Born-Oppenheimer e da intuição química que limita a flexibilidade matemática expressa no método do campo autoconsistente, **SCF (Self Consist-Field)** mostrado na *Figura 1.1a* seguir:

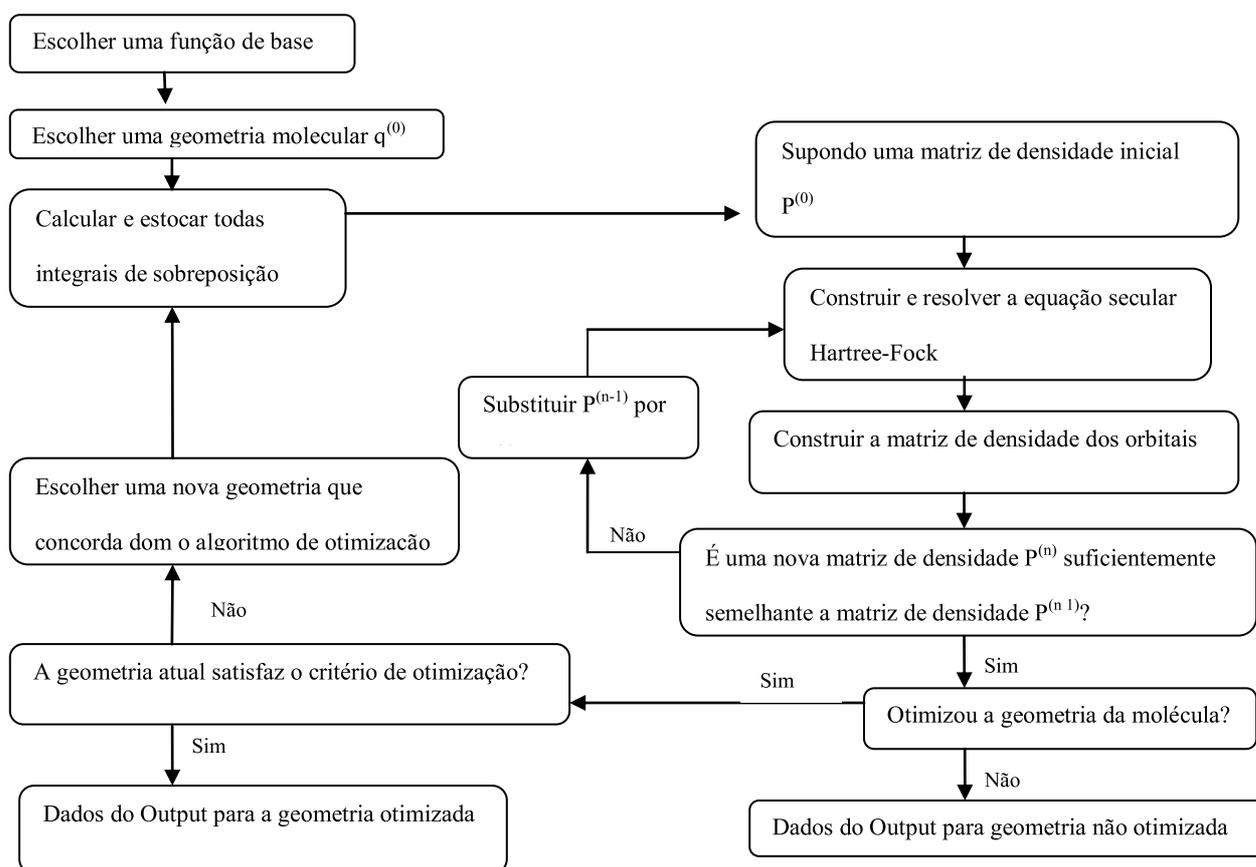


Figura- Procedimento de SCF.

Nas equações do método autoconsistente, o limite HF é arquivado por um conjunto de base infinito, o qual, necessariamente, permite uma descrição ideal da densidade eletrônica. Na prática, entretanto, ninguém pode fazer uso de um conjunto de base infinito. Então, tem-se muito trabalho para identificar funções matemáticas que descrevam funções de onda de maneira mais eficiente, eficiência esta que envolve três considerações:

- Nas ausências de simplificadas aproximações adicionais, o número de integrais aumenta aproximadamente com N^4 , onde N é o número de funções de base. Assim, é melhor manter o menor número total de funções de base.

- Escolher conjunto de base na forma funcional que permite resolver várias integrais nas equações HF. Um conjunto de base grande pode representar um progresso computacional em relação a um conjunto de base menor.

- As funções de base devem ter grande amplitude em regiões do espaço onde a probabilidade da densidade eletrônica também é grande e pequena amplitude onde a probabilidade de densidade eletrônica é pequena.

Com isso, a otimização simultânea destas três considerações é o coração do desenvolvimento de funções de base, que podem ser divididas em duas classes: as Funções do Tipo Slater (**STFs**) – **Slater-Type Functions** e as Funções do Tipo Gaussianas (**GTFs**) – **Gaussian-Type Functions**.

As STFs foram criadas a fim de corrigir a Teoria de Hückel Extendida, na qual todo o núcleo de elétrons é ignorado, assumindo que:

- o núcleo de elétrons não varia em diferentes ambientes químicos (orbitais) e;

- a transformação em seus orbitais como uma função ambiente não são consequências químicas, energéticas ou de outra forma.

Contudo, o conjunto de orbitais da camada de valência está incluso em todos métodos modernos de química quântica, representado de forma matemática como:

$$\varphi(r, \theta, \phi) = Nr^{n-1} e^{-r\alpha} Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (\text{I.8})$$

onde N é a constante de normalização, α é um expoente que pode ser escolhido a partir de um conjunto simples de regras desenvolvidas por Slater [10] que depende, a propósito, do número quântico principal, n , para o orbital de valência.

Em 1850, Boys propôs uma modificação nas STFs de modo que as integrais moleculares pudessem ser mais facilmente avaliadas, já que estas quando geradas a partir de STFs eram de difícil resolução analítica [11], ou seja:

$$\varphi(r, \theta, \phi) = Nr^{2n-2} e^{-r^2\alpha} Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (\text{I.9})$$

onde N é a constante de normalização e α é um expoente a ser otimizado e dependendo da quantidade de α s usados, determina-se o tamanho das GTFs.

A vantagem de utilizar as GTFs no cálculo das integrais de interação eletrônica reside no fato de que o produto de duas funções em centros diferentes é equivalente a uma só função em um só centro [12], permitindo assim reduzir integrais multicêntricas a integrais

calculadas em termos de funções centradas no mesmo ponto. Apesar da possibilidade de uma maior velocidade e eficiência nos cálculos das integrais de mais de um elétron, as GTFs não são ótimas funções de base por si só porque apresentam um comportamento funcional menos adequado na região do núcleo atômico pontual do que as funções de Slater [13]. Deste modo, a utilização de funções gaussianas exige um aperfeiçoamento, por este motivo são adicionadas a estas funções outras funções, as quais são chamadas de funções de polarização e/ou funções difusas para torná-las aptas de tal forma que represente coerentemente cada orbital e assim reproduzir a energia do sistema atômico ou molecular estudado conforme a necessidade expressa com o problema em cada situação.

Funções de Polarização

Para que possamos descrever o emprego das funções de polarização em cálculos moleculares, falaremos inicialmente sobre a diferença entre orbitais atômicos e funções de base. Explicaremos a diferença entre orbitais atômicos e funções de base, utilizando a molécula de amônia, NH_3 , como um exemplo ilustrativo. A energia de ativação, ou seja, a energia mínima para formar a ligação da molécula de amônia, com geometria piramidal, é equivalente a de $5,8 \text{ Kcal mol}^{-1}$, porém o cálculo HF com conjuntos de base de funções (s e p) prediz que a estrutura da molécula de amônia é de geometria planar.

O problema com o cálculo é que as funções s e p centradas sob átomos não evitam, suficientemente, a flexibilidade matemática para descrever adequadamente a função de onda

para a geometria piramidal. Isto é verdade mesmo que os átomos de nitrogênio e hidrogênio pudessem ser individualmente bem descritos inteiramente pelas funções s e p porque para o estado fundamental de átomos do primeiro e segundo período da Tabela Periódica, bons valores de energia são obtidos usando apenas uma base com funções s e p [13]. Os orbitais moleculares, os quais são autofunções da equação de Schrödinger, envolvem múltiplos núcleos em várias posições no espaço e por isto requerem mais flexibilidade matemática do que os átomos.

Devido à utilidade dos orbitais atômicos (AO- Atomic Orbitals) como GTFs, esta flexibilidade é sempre adicionada na forma de funções de base correspondentes ao número quântico principal de maior momento angular (ℓ) do que o orbital de valência. Assim, para a primeira fila da tabela periódica, as funções de polarização mais úteis são as GTFs d , e para o átomo de hidrogênio, as GTFs p , ou seja, $\ell=2$ para os átomos da primeira fila e $\ell=1$ para o hidrogênio. Uma função d sob o oxigênio pode polarizar uma função p para melhorar a descrição da ligação O-H na molécula de água, assim como, o uso das funções p para polarizar as funções s do hidrogênio. Do mesmo modo, a adição de funções d aos conjuntos de base do nitrogênio faz com que a teoria HF calcule corretamente a energia mínima total da geometria piramidal da amônia, embora alguns erros nos cálculos das energias de ativação ainda existam no limite HF por causa da ausência da correlação eletrônica.

Uma variedade de outras propriedades moleculares prova ser sensível na presença de funções de polarização. Portanto, funções d sob os átomos da segunda fila da tabela periódica são também requeridas a fim de fazer cálculos razoáveis para a geometria das

moléculas, incluindo cada átomo em situações de ligações hipervalentes, por exemplo: fosfatos, sulfóxidos, siliconatos, etc.

O custo computacional aumenta com a adição de funções de polarização e faz com que o número total de funções cresça muito rapidamente com suas inclusões, logo, cálculos mais rápidos fazem uso de somente um conjunto de funções de polarização. Pople e colaboradores introduziram um esquema de nomenclatura simples para indicar a presença destas funções, '*'. Assim, 6-31G* implica num conjunto de base de funções d adicionadas para polarizar as funções p na base 6-31G. Uma segunda estrela implica em funções p sobre H, exemplificando: 6-31G** [14].

Trabalhos subsequentes de Dunning e colaboradores [15] mostram que existe uma relação entre o valor de funções de polarização adicionadas e o valor da valência de funções de base descontráidas. Em particular, existe uma aproximação da igualdade entre o passo de descontração e a adição de um conjunto novo de funções de polarização, incluindo um novo conjunto com momento angular mais alto, ou seja, conjuntos de base Double- ζ deveriam incluir funções d em átomos pesados e funções p no hidrogênio, os conjuntos de base triple- ζ deveriam incluir uma função f e duas funções d em átomos pesados e uma função d e duas funções p para o hidrogênio, etc. A nomenclatura adotada para a polarização dos conjuntos de base de Dunning e colaboradores [15] é cc-pVnZ, onde n representa D (Double), T (Triple), Q (Quadruple), 5 (Quintuple) e 6 (Sextuple).

Reconhecendo a tendência para usar mais do que um conjunto de funções de polarização em cálculos modernos, a nomenclatura padrão para os conjuntos de base de Pople, agora inclui uma nomenclatura explícita daquelas funções em vez da nomenclatura

estrela. Desta forma, 6-31G(d) é preferida a 6-31G* porque esta nomenclatura obviamente externa o número de funções de polarização usado. Portanto, a base 6-31G (3d2fg, 2pd), implica que átomos pesados são polarizados por três conjuntos de função d , dois conjuntos de função f e um conjunto de funções g , e átomos de hidrogênio por dois conjuntos de funções p e uma d .

Um conjunto de base parcialmente polarizada, MIDI! (onde ‘!’ é pronunciado com ‘vigor’; em alguns programas de estrutura eletrônica, a abreviação MIDIX é empregada para evitar complicações associada com a interpretação do ponto de exclamação), tem sido introduzida por Cramer, Truhlar e colaboradores, os quais adaptaram uma filosofia diferente em seu desenvolvimento [16-17]. Ao invés de otimizar os conjuntos de base com respeito à energia molecular, eles procuraram projetar um conjunto de base econômico para cálculos de otimização de geometria e de carga parcial sobre moléculas de tamanho médio, incluindo espécies neutras, cátions e anions, com ênfase especial aos grupos funcionais que são importantes para biomoléculas. O conjunto de base MIDI! tem funções d em todos os átomos mais pesados que H. Embora muito menor do que o conjunto de base 6-31G(d), por exemplo, em comparação direta, ela fornece boas geometrias e cargas.

Finalmente, um ponto importante da nomenclatura é que mais conjuntos de base são definidos para usar as cinco funções d esféricas, mas uma importante exceção é a 6-31G* (ou 6-31G(d)), a qual é definida para usar seis funções d cartesianas. Para evitar ambigüidade, é útil modificar o nome do conjunto de base quando o número de funções d empregadas não é o mesmo que o assumido como *default*, porém enquanto a nomenclatura do conjunto de base ‘3-21G*’ for encontrada na literatura, a ambigüidade não será evitada.

Pople e colaboradores sugeriram o uso das bases 3-21G como funções de polarização diretas das bases 6-31G* [18-20] de todos átomos a partir da segunda fila, isto é, sem qualquer reotimização de expoentes e, por isto, problemas graves de geometria surgem para átomos hipervalentes da segunda fila sem funções d , mantendo uma boa descrição barata dos átomos da primeira fila. Então, para diferenciar esta situação da normal ‘*’, eles chamaram estes conjuntos de base 3-21G^(*), e que esta notação deveria ser sempre usada para enfatizar que as funções d não estão presentes nos átomos da primeira fila.

Funções Difusas

A energia mais alta dos orbitais moleculares de ânions, estados eletrônicos altamente excitados e complexos supramoleculares livres tendem a descrever densidades eletrônicas espacialmente muito mais difusas do que várias combinações de orbitais moleculares. Quando os conjuntos de base não têm a flexibilidade necessária para descrever uma ligação fraca, ou seja, quando o elétron está longe da densidade remanescente, podem ocorrer erros significativos de energia e outras propriedades moleculares. Para visualizar esta limitação, os conjuntos de base são frequentemente ampliados com funções de base difusas quando seu uso for justificado.

Na família de conjuntos de base de Pople, a presença de funções difusas é indicada por um ‘+’ no nome do conjunto de base. Assim, 6-31+G(d) indica que átomos pesados foram ampliados com uma função s e um conjunto de funções p de expoentes pequenos.

Uma segunda adição indica a presença de funções *s* difusas sobre H, por exemplo: 6-31++G(3df,2pd) [18-19, 21].

Na família de conjuntos de base *cc-pVnZ* de Dunning, as funções difusas dos átomos são indicadas pelo prefixo 'aug'. Entretanto, um conjunto de funções difusas é adicionado para cada momento angular já presente. Assim, aug-cc-pVTZ tem funções *s*, *p*, *d* e *f* difusas em átomos pesados e funções *p* e *d* difusas para os átomos de H e He.

Particularmente, para os cálculos de acidez e afinidade eletrônica, funções difusas são sempre requeridas. Por exemplo, a acidez do ácido fluorídrico aumenta 44 Kcal/mol quando o conjunto de base 6-31+G(d) é usado ao invés do 6-31G(d).

Capítulo II: O Método da Coordenada Geradora

O advento da Teoria Quântica na década de 1920 proporcionou um grande salto na compreensão da estrutura eletrônica da matéria, incluindo o comportamento dos núcleos. Entretanto, uma compreensão mais profunda sobre a estrutura nuclear e suas propriedades ocorreria somente na década seguinte e, apesar da escassez de dados experimentais, o desenvolvimento de modelos teóricos visando explicar e prever estas propriedades não demorou a acontecer.

Este é o caso, por exemplo, do modelo de partículas independentes, cujo desenvolvimento começou em 1933 com W. Elsasser e K. Guggenheimer [22-24]. Neste modelo, assume-se que o núcleo é composto por partículas elementares denominadas *núcleons* que apresentam comportamento individual, quase como estados independentes de ligação. Estes núcleons estão confinados por um potencial nuclear e a interação entre eles é tratada como uma perturbação neste potencial. Mais além, os núcleos movem-se em órbitas bem definidas e possuem um conjunto de números quânticos que caracterizam seus estados, sendo cada um deles preenchido por um número específico de prótons e nêutrons determinado pelo Princípio de Exclusão de Pauli. Este modelo foi fortemente inspirado pelo sucesso da Mecânica Quântica na compreensão da estrutura eletrônica e, dessa forma, a idéia de uma estrutura de camadas nucleares surgiu como uma consequência quase que natural [25-26]. Entretanto, detalhes mais refinados sobre a estrutura de camadas nucleares somente foram conseguidos em 1949 com o trabalho de H. Jensen e M. G. Mayer sobre a

hipótese de que os núcleos estariam sujeitos também a um acoplamento do tipo spin-órbita [27], fato que lhes rendeu o Prêmio Nobel de Física em 1963.

Por outro lado, o modelo da gota líquida para o núcleo, idealizado por Bohr em 1936 [25, 28], evidencia o comportamento coletivo dos núcleos como um todo. A substância nuclear, segundo este modelo, é comparada a um fluido quase incompressível de densidade praticamente uniforme e energia de ligação por partícula aproximadamente constante. Esta energia de ligação pode ser modificada pela diferença na energia de interação eletrostática em diferentes regiões do fluido ou pelo decréscimo na quantidade de ligações feitas por uma partícula quando situada na superfície da gota. Esta energia extra recebe o nome de tensão superficial e é proporcional à extensão da superfície. Assim, no intuito de diminuir a tensão superficial, a superfície deve ser mínima, o que, para um dado volume, leva a forma esférica [29]. O sistema é susceptível a deformações e dois eventos distintos podem ocorrer. No primeiro, partículas da superfície podem ser emitidas em analogia a evaporação de moléculas em uma gota de fluido—processo correlacionado com a emissão de radiação. No segundo, deformações em torno da geometria de equilíbrio (esférica) podem ocorrer, provocando oscilações que diminuem o perímetro disponível para a ação da tensão superficial mais rapidamente que a energia eletrostática entre as partículas [25], culminando com a ruptura do núcleo em duas ou mais partes – processo em que se baseou Bohr, juntamente com J. A. Wheeler, para explicar o fenômeno da fissão nuclear [30].

Analisando o modelo de partículas independentes e o da gota líquida, pode-se perceber que cada um deles é reflexo de características distintas apresentadas por um mesmo núcleo. Ou seja, se por um lado Bohr e outros descreveram com sucesso rotações e

deformações coletivas nos núcleos através de uma analogia com rotações e deformações moleculares, na qual, muitas vezes, uma análise em termos de muitos corpos é desnecessária. Por outro lado, quando se deseja determinar quantidades como frequências de vibrações coletivas a partir do que se conhece sobre as propriedades individuais dos núcleos [31]. O que leva a pergunta: Como descrever quanticamente um sistema de muitas partículas independentes com características de modo coletivos de movimento [32]? Foi a busca pela resposta a esta pergunta que inspirou James J. Griffin, David L. Hill e John A. Wheeler a desenvolverem, na década de 1950, o Método da Coordenada Geradora (GCM) [31-32], descrito na seção seguinte e a introdução do GCM na Física da Estrutura Eletrônica será abordada na próxima seção, destacando sua união com o método Hartree-Fock, além dos refinamentos que derivaram desta introdução.

O desenvolvimento do Método da Coordenada Geradora (MCG)

A idéia de uma coordenada geradora foi apresentada por D. L. Hill e J. A. Wheeler em 1953 [32], dentro da Física Nuclear, com o objetivo de colocar os aspectos de movimentos coletivos e os de partículas independentes sob um único e coerente formalismo mecânico-quântico. Dessa forma, nasceu o MCG, que, em 1957, foi aplicado pela primeira vez por J. J. Griffin e J. A. Wheeler a um estado ligado e claramente reconhecido como um poderoso procedimento variacional [31], mais até que o método variacional de Rayleigh-Ritz (RR). Isto porque o MCG, apesar de ainda ter como ponto de partida uma função tentativa, $\Phi_{\alpha}(r_1, \dots, r_N)$, está baseado em uma equação íntegro-

diferencial – a equação de Griffin-Hill-Wheeler(GHW)- que, por meio de uma transformação integral, leva à energia do sistema e à função de onda, com a qual todas as outras propriedades observáveis podem ser obtidas

$$\Phi_{\alpha}(r_1, \dots, r_N) \xrightarrow{\text{GHWansatz}} \begin{cases} \Psi(r_1, \dots, r_N) \rightarrow \begin{cases} \dots \\ \dots \end{cases} \\ E_{\min} \end{cases} \quad . \quad (\text{II.1})$$

No MCG, o parâmetro α , ou coordenada geradora, desempenha um papel fundamental, tendo sido inicialmente introduzido como parâmetro de deformação dentro do modelo da gota líquida nuclear e, assim, responsável por definir seu tamanho ou forma [31-32].

Na formulação original feita por Griffin e Wheeler, o potencial sentido pelas partículas é trocado por um potencial fictício caracterizado pelo parâmetro de deformação. Em seguida, resolve-se a equação para as partículas individuais movendo-se sob este potencial e, a partir das funções de onda mono-nucleônicas, monta-se um determinante de Slater que constitui uma função de onda tentativa, $\Phi_{\alpha}(r_1, \dots, r_N)$, para a solução do problema de muitos corpos. Esta função tentativa, também chamada função geradora, ou função semente, entra na transformação integral juntamente com uma função peso, $f(\alpha)$, a qual, uma vez determinada, leva a uma expressão para a função de onda de muitos corpos, $\psi(r_1, \dots, r_N)$, solução da equação de Schrödinger, *equação (I.1)*, com um operador Hamiltoniano que caracteriza o sistema sob estudo

$$\Psi(r_1, \dots, r_N) = \int f(\alpha) \Phi(r_1, \dots, r_N) d\alpha \quad (\text{II.2})$$

Na equação (II.2), r_i representa o conjunto de coordenadas espaciais e de spin, α é a coordenada geradora, $f(\alpha)$ é a função peso e Φ_α é a função geradora.

Sendo a energia do sistema, E , definida como

$$E = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (\text{II.3})$$

e substituindo a equação (II.2) na equação (II.3), tem-se:

$$E = \frac{\int f^*(\alpha) K(\alpha, \beta) f(\beta) d\alpha d\beta}{\int f^*(\alpha) S(\alpha, \beta) f(\beta) d\alpha d\beta} \quad (\text{II.4})$$

na qual os *kernels* de troca, $K(\alpha, \beta)$, e de recobrimento, $S(\alpha, \beta)$, são dados por:

$$K(\alpha, \beta) = \int d^3 r_1 \dots \int \Phi_\alpha^*(r_1, \dots, r_N) \hat{H} \Phi_\beta(r_1, \dots, r_N) d^3 r_N \quad (\text{II.5})$$

e

$$S(\alpha, \beta) = \int d^3 r_1 \dots \int \Phi_\alpha^*(r_1, \dots, r_N) \Phi_\beta(r_1, \dots, r_N) d^3 r_N \quad (\text{II.6})$$

Considerando a energia, E , equação (II.4), como um funcional da função peso,

$E \rightarrow E[f(\alpha)]$, e aplicando a condição variacional, $\frac{\partial E}{\partial f} = 0$, tem-se

$$\frac{\partial E}{\partial f^*(\alpha)} = \frac{\int d_\alpha \int [H(\alpha, \beta) - ES(\alpha, \beta)] f\beta + \text{complexo_conjugado}}{\int S(\alpha, \beta) f\beta d\alpha d\beta} = 0 \quad (\text{II.7})$$

a partir da qual chega-se à equação de autovalores generalizada denominada equação GHW

$$\int [K(\alpha, \beta) - ES(\alpha, \beta)] f(\beta) = 0 \quad (\text{II.8})$$

A Equação de Griffin-Hill-Wheeler (GHW)

A equação GHW, *equação (II.8)*, é uma equação integral não trivial contendo dois núcleos devido à não-ortogonalidade da base. Ela define um problema de autovalores quando fornecidas as condições de contorno apropriadas, as quais, para um estado ligado, consistem, por exemplo, da exigência que Ψ seja quadraticamente integrável [13]. A equação GHW pode ser resolvida discretizando a integral em uma malha de valores de coordenadas geradoras, fornecendo, assim, os autovalores E e as funções peso $f(\beta)$. As funções peso $f(\beta)$ são então usadas, juntamente com as funções geradoras $\Phi_\alpha(r_1, \dots, r_N)$, na aproximação para a função de onda de muitos corpos $\Psi_\alpha(r_1, \dots, r_N)$, *equação (II.2)*. Finalmente, com a função de onda de muitos corpos, pode-se calcular as propriedades observáveis do sistema. Entretanto, questões importantes para o sucesso da aplicação do método devem ser consideradas [13]: (i) como escolher as coordenadas geradoras para um

dado problema? (ii) como escolher as funções geradoras? (iii) como resolver a equação GHW?

Com uma análise do sistema sob estudo, e talvez até das propriedades observáveis que se deseja calcular, pode-se estimar quais graus de liberdade são mais relevantes, e um bom ponto de partida pode ser escolher tais graus de liberdade como coordenadas geradoras [13]. Exemplo claro deste procedimento é a primeira aplicação do MCG [32], na qual a coordenada geradora foi escolhida como parâmetro de deformação do potencial nuclear devido ao movimento coletivo dos núcleos.

As funções geradoras $\Phi_\alpha(r_1, \dots, r_N)$ devem ser bem comportadas e possuir as mesmas condições de contorno do problema sob estudo. Ela pode ser, por exemplo, a solução para um sistema similar, porém, mais simples [33] ou então uma solução aproximada do próprio sistema em questão - algo como uma aproximação de ordem zero do problema. Vale ressaltar ainda a possibilidade de escolher uma função qualquer para $\Phi_\alpha(r_1, \dots, r_N)$ de acordo com as características físicas do problema [13].

Por outro lado, a solução analítica da equação GHW, para um sistema de muitas partículas, está além das ferramentas matemáticas disponíveis atualmente, havendo poucos exemplos do contrário e apenas para sistemas simples [34-35]. Assim, resta recorrer a procedimentos numéricos adequados que vão desde o recobrimento Gaussiano [31] até técnicas de discretização [13, 33, 36].

O Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock

Com o crescente aumento dos estudos enfocando o MCG, não somente na Física Nuclear, mas também em outras áreas, não demoraria para que a transformação integral idealizada por Griffin, Hill e Wheeler fosse aplicada ao esquema Hartree-Fock. Foi o que fizeram Mohallem, Dreizler e Trsic, em 1986, numa palestra no Simpósio Sanibel, ocorrido na Flórida naquele ano [34]. Este artigo é a origem do que se conhece hoje como o Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock (MCG-HF) [13, 37].

No MCG-HF, a parte espacial da função de onda monoelétrica de um sistema é dada por

$$\Psi(r_1) = \int f(\alpha) \Phi_\alpha(r_1) d\alpha \quad (\text{II.9})$$

na qual, a função geradora $\Phi_\alpha(r_1)$ - um orbital do tipo Slater (STO) ou Gaussiano (GTO) - depende da coordenada geradora, α , e $f(\alpha)$ é a função peso desconhecida. Com a função tentativa escrita como um determinante de Slater dos orbitais, a minimização da energia total com relação às funções peso, $f_i(\alpha)$, leva às Equações Griffin-Hill-Wheeler-Hartree-Fock (GHW-HF)

$$\int [F(\alpha, \beta) - \varepsilon S(\alpha, \beta)] f_i(\beta) d\beta = 0 \quad (\text{II.10})$$

Os kernel de recobrimento e de Fock são dados, respectivamente, por

$$S(\alpha, \beta) = \langle \phi_{i,\alpha}(r_1) | \phi_{i,\beta}(r_1) \rangle \quad (\text{II.11})$$

e

$$F(\alpha, \beta) = h(\alpha, \beta) + \sum_j [2J_j(\alpha, \beta) - K_j(\alpha, \beta)] \quad (\text{II.12})$$

com

$$h(\alpha, \beta) = \langle \phi_{i,\beta}(r_1) | h_0(1) | \phi_{i,\beta}(r_1) \rangle \quad (\text{II.13})$$

Os termos de Coulomb e troca, $J_j(\alpha, \beta)$ e $K_j(\alpha, \beta)$, respectivamente, da equação (II.12) são

$$J_j(\alpha', \beta) = \int d\alpha \int f_j(\alpha') f_j(\beta') V(\alpha, \alpha'; \beta', \beta) \quad (\text{II.14})$$

e

$$K(\alpha, \beta) = \int d\alpha' \int f_j(\alpha') f_j(\beta') V(\alpha, \alpha'; \beta\beta') \quad (\text{II.15})$$

com

$$V(\alpha, \alpha'; \beta', \beta) = \langle \phi_{i,\alpha} \phi_{i,\alpha'} | \hat{\Gamma}_{ij}^{-1} | \phi_{i,\beta'} \phi_{i,\beta} \rangle \quad (\text{II.16})$$

e

$$V(\alpha, \alpha'; \beta, \beta') = \langle \phi_{i,\alpha} \phi_{i,\alpha'} | \hat{\Gamma}_{ij}^{-1} | \phi_{i,\beta} \phi_{i,\beta'} \rangle \quad (\text{II.17})$$

Assumindo um $f(\alpha)$ inicial e um critério de convergência, a equação (II.10) pode ser resolvida por um processo iterativo usando técnicas de discretização [13, 37].

A versão discretizada das Equações GHW-HF fica sendo

$$\sum_l^N [F(\alpha_k, \beta_l) - \varepsilon S(\alpha_k, \beta_l)] f(\beta_l) = 0 \quad (\text{II.18})$$

com os elementos de matriz $S(\alpha_k, \beta_l)$ e $F(\alpha_k, \beta_l)$ definidos nas *Equações de (II.11)* à *(II.13)*, respectivamente, e os termos de Coulomb, $J_j(\alpha_k, \beta_l)$, e troca, $K_j(\alpha_k, \beta_l)$, definidos nas *Equações (II.14)* e *(II.15)*, respectivamente.

O MCG-HF tem sido utilizado, principalmente, no desenvolvimento de conjuntos de bases universais do tipo Slater e Gaussiano [13, 38-39]. Porém, as aplicações do MCG-HF na estrutura eletrônica não teriam sido bem sucedidas se não tivessem respondido efetivamente às três perguntas apresentadas, das quais parece depender o sucesso de *qualquer* aplicação do MCG, pois derivam de características intrínsecas ao método. Na *equação (II.10)*, adotou-se que as funções geradoras são orbitais monoelétrônicos do tipo Gaussiano ou de Slater, assim, apenas a resposta à segunda pergunta é conhecida. As respostas às outras duas perguntas que restam a primeira e a última, ou seja, como escolher as coordenadas geradoras, α , para um dado problema e como resolver a equação GHW, está correlacionada dentro do formalismo MCG-HF e serão apresentadas a seguir.

A Discretização Integral e a Troca de Rótulos

Tendo em vista que as ferramentas matemáticas disponíveis atualmente impedem uma solução exata ou analítica da equação GHW-HF, *equação (II.10)*, para qualquer sistema não-trivial, suas integrais devem ser resolvidas estabelecendo os valores ótimos dos pontos que as discretizam [13]. Especificamente no caso da equação GHW-HF, estes pontos são os

valores das coordenadas geradoras, α , (expoentes das funções GTO ou STO) e que podem ser otimizados um a um de modo que forneçam o valor mínimo de energia total do sistema, processo conhecido como discretização variacional (DV). Quando aplicado à equação GHW-HF, a DV reduz o MCG-HF ao método variacional Rayleigh-Ritz, que formalmente leva, por sua vez, à equação de Roothaan [8].

Buscando uma forma mais adequada de atacar o problema sobre como resolver a equação GHW-HF (terceira pergunta apresentada), Mohallem, em 1986, rediscutiu a discretização desta equação e mostrou que uma integração numérica cuidadosa, preservando seu caráter integral, poderia ser uma alternativa bastante eficaz [13, 34]. Mohallem fez com que o processo de solução da equação de autovalores, *equação (II.10)*, estivesse acoplado à escolha dos parâmetros da função peso, $f(\alpha)$, explorando uma representação contínua do MCG e evitando, assim, a otimização explícita dos parâmetros α , ou seja, de cada um dos pontos de discretização, como acontece no método variacional de Rayleigh-Ritz.

Deste modo, os pontos de discretização passam a ser determinados com base em uma escolha de N pontos igualmente espaçados que preenchem o intervalo de integração levando em conta a importância dos diferentes $f_i(\alpha)$. Simultaneamente, a equação GHW-HF é resolvida de modo que seu caráter integral é preservado dando nome ao procedimento de *discretização integral* (DI) [3,10].

Com isso, Mohallem respondeu de uma única vez as duas perguntas que faltavam, ou seja, como escolher as coordenadas geradoras para um dado problema e como resolver a equação GHW-HF, *equação (II.10)*, já que suas respostas estão acopladas à DI [34]. Além disto, com a introdução da DI, a maneira como a energia total do sistema é obtida, segundo o

ansatz GHW, equação (II.1), também é modificada, pois o método Rayleigh-Ritz não é mais utilizado, ou seja:

$$E_{RR}^{\min} \rightarrow E_{DI}^{\min} \quad (\text{II.19})$$

Entre as vantagens frente à DV, a DI: **(i)** economiza tempo computacional, evitando a otimização dos valores discretos das coordenadas geradoras, **(ii)** proporciona uma representação adequada de vários estados excitados em uma única diagonalização (desde que tenham a mesma simetria da função geradora, Φ), e por fim, **(iii)** possibilita a construção de uma melhor função de onda ao preencher de forma mais efetiva o intervalo de integração, evitando a otimização do valor médio de um determinado operador em detrimento dos demais [34, 37].

No entanto, ao contrário das funções STO, as funções GTOs são muito difusas e decaem de maneira extremamente lenta conforme cresce o valor de α , seu expoente no formalismo MCG-HF, prejudicando a precisão da integração. Assim, visando cobrir mais eficientemente a região significativa do intervalo de integração para as funções peso, e com isso conseguir uma integração numérica precisa, Mohallem adotou uma *troca de rótulos* para o espaço da coordenada geradora, α , [34, 40] quando funções GTO são usadas

$$\Omega = \frac{\log \alpha}{A} \quad \text{com } A > 1 \quad (\text{II.20})$$

e

$$\Omega_N = \Omega_{\min} + (N-1)\Delta\Omega \quad (\text{II.21})$$

na qual, N é o número de pontos de discretização e $\Delta\Omega$ é o intervalo de integração responsável por definir o tamanho da base [13].

Com essa troca, as funções peso para cálculos com GTOs tornam-se estreitas e suaves, portanto, discretizáveis, e agora com pontos igualmente espaçados no espaço Ω . Isso possibilitou uma integração numérica mais eficiente, sem acarretar, entretanto, problema algum quando funções STO são usadas, possibilitando o uso da troca de rótulos também nestes casos [37].

Desta maneira, o formalismo MCG-HF possibilitou estabelecer um único conjunto de funções de base GTO e STO que pode ser usado universalmente no cálculo de propriedades atômicas e moleculares, para estados fundamental e excitados dos átomos neutros, ânions e cátions do Hidrogênio até Xenônio [13, 38-39].

Capítulo III: Materiais e Método

O principal material deste trabalho são as funções de base geradas pelo Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock Polinomial (pMCG-HF) [1]. A seguir, mostrado na *Tabela 1*, como um exemplo das funções de base dos átomos da primeira fila da Tabela Periódica, do Apêndice desta dissertação, encontra-se a função de base contraída [2] do boro.

Tabela 1: Expoentes “s” e “p” da função de base do boro

EXPOENTES “s”		EXPOENTES “p”	
s 8 1.0		p 4 1.0	
.2963368E+05	.6325723E-04	55.58795653	.00090945
.4836871E+04	.4832876E-03	17.93395588	.00451143
.1038442E+04	.2729272E-02	6.03880519	.02120740
.2932504E+03	.1089986E-01	2.12229366	.07822216
.9801330E+02	.3599670E-01	p 1 1.0	
.3599506E+02	.1008751E+00	0.77846568	1.0000
.1392611E+02	.2158413E+00	p 1 1.0	
.5676043E+01	.2659000E+00	.29802521	1.000000
s 5 1.0		p 1 1.0	
.9801330E+02	.1078677E-03	.11908198	1.00000
.3599506E+02	.1006028E-02	p 1 1.0	
.1392611E+02	.6465071E-02	.04966137	1.0000000
.5676043E+01	.2820968E-01		
.2460468E+01	.7621946E-01		
s 1 1.0			
1.11698337	1.00000		
s 1 1.0			
.47947906	1.00000		
s 1 1.0			
.19461962	1.000000		
s 1 1.0			
.07469605	1.000000		

As funções de base obtidas pelo pMCG-HF [2], que são objetos de estudo desta dissertação, possuem 13 expoentes s e 08 expoentes p como pode ser observado na *Tabela 1*. Elas foram polarizadas adicionando duas funções d e uma função f com expoentes selecionados da própria função de base. Este critério desenvolvido aqui nesta dissertação será apresentado em detalhes no próximo capítulo (Capítulo IV: Resultados e discussões).

Os cálculos foram realizados utilizando o programa GAUSSIAN [41] nos computadores do Grupo de Química Quântica do Instituto de Química de São Carlos (USP).

Capítulo IV: Resultados e discussão

A fim de poupar o custo computacional na obtenção de funções de polarização, foi iniciado um estudo com o intuito de selecionar do próprio conjunto de base os expoentes adequados para a polarização. Contudo, a maneira que os expoentes foram selecionados foi dividida em duas etapas, nomeadas como **seleção dos expoentes “s”** e **seleção dos expoentes “p”**.

Na primeira etapa, os expoentes “s” selecionados foram combinados de seis maneiras diferentes para os átomos de boro, carbono, nitrogênio, oxigênio e flúor presentes no Apêndice e, aproveitando a *Tabela 1*, pode-se visualizar melhor como exemplo a idéia geral de seleção. Então, observando a coluna Expoentes “s” da *Tabela 1*, foram selecionados os três expoentes “s” anteriores ao expoente “s” mais difuso (o último da coluna), logo estes expoentes foram rearranjados com todos os expoentes diferentes, depois com o expoente da função “f” igual ao expoente da função “2d” e por último fazendo o expoente da função “f” igual ao expoente “1d” conforme exposto nas colunas s1, s2 e s3 das *Tabelas 2, 4, 6, 8 e 10* nomeadas como: *Combinações de expoentes de polarização “s” para os respectivos átomos*. Da mesma forma, foram selecionados três expoentes “s” anteriores ao segundo expoente “s” mais difuso (penúltimo da coluna: expoentes “s” da *Tabela 1*) e então eles foram rearranjados respeitando a sequência de combinações feitas para s1, s2 e s3. Feito isto, foram criadas as combinações s4, s5 e s6 das *Tabelas 2, 4, 6, 8 e 10*; e com tais combinações, os diferentes cálculos químico-quânticos foram realizados para obter a energia atômica de cada uma das novas funções de base expostas nas *Tabelas 3, 5, 7, 9 e 11*.

Portanto, as *Tabelas 2, 4, 6, 8 e 10* apresentam os expoentes de polarização extraídos dos expoentes do tipo “s”, com os quais obteve-se os resultados de cálculos químico-quânticos expressos nas *Tabelas 3, 5, 7, 9 e 11* para os átomos da primeira fila.

Tabela 2: Combinações de expoentes de polarização “s” para o átomo de boro

	s1	s2	s3	s4	s5	s6
1d	1,12	1,12	1,12	0,25	0,25	0,25
2d	0,48	0,48	0,48	1,12	1,12	1,12
1f	0,19	0,48	1,12	0,48	1,12	0,25

Tabela 3: Energia (Hartree) obtida em diferentes cálculos quânticos para cada combinação de expoentes de polarização “s” do átomo de boro

	s1	s2	s3	s4	s5	s6
HF	-24,5320167	-24,5320204	-24,5320164	-24,530320	-24,5303206	-24,5303201
B3LYP	-24,6651409	-24,6651453	-24,6651525	-24,6645951	-24,6646049	-24,6646041
MP2	-24,5746161	-24,5320215	-24,5753002	-24,565121	-24,5662502	-24,5650332
MP4	-24,5920458	-24,5929220	-24,5920885	-24,5803409	-24,5808756	-24,5801306
CCSD	-24,5942772	-24,5950933	-24,5943835	-24,5831849	-24,5837249	-24,5830186
CISD	-24,5943076	-24,5951261	-24,5944162	-24,5831858	-24,5837287	-24,5830203
QCISD	-24,5943180	-24,5951371	-24,5944275	-24,5831936	-24,5837367	-24,5830283

Tabela 4: Combinações de expoentes de polarização “s” para o átomo de carbono

	s1	s2	s3	s4	s5	s6
1d	1,16	1,16	1,16	2,96	2,96	2,96
2d	0,58	0,58	0,58	1,16	1,16	1,16
1f	0,27	0,58	1,16	0,58	1,16	2,96

Tabela 5: Energia (Hartree) obtida em diferentes cálculos quânticos para cada combinação de expoentes de polarização “s” do átomo de carbono

	s1	s2	s3	s4	s5	s6
HF	-37,6929487	-37,6929528	-37,6929502	-37,6917341	-37,6917346	-37,6917328
B3LYP	-37,8610969	-37,8610989	-37,8611061	-37,8607673	-37,8607738	-37,8607839
MP2	-37,7567685	-37,7597162	-37,7596351	-37,7483246	-37,7491304	-37,7460346
MP4	-37,7755038	-37,7778609	-37,7774302	-37,7629294	-37,7631138	-37,7604084
CCSD	-37,7761533	-37,7783531	-37,7780303	-37,7641248	-37,7643607	-37,7617975
CISD	-37,7757727	-37,7779684	-37,7776503	-37,7638321	-37,7640741	-37,7615171
QCISD	-37,7761822	-37,7783835	-37,7780624	-37,7641523	-37,764392	-37,7618275

Tabela 6: Combinações de expoentes de polarização “s” para o átomo de nitrogênio

	s1	s2	s3	s4	s5	s6
1d	2,3	2,3	2,3	5,5	5,5	5,5
2d	0,9,	0,9	0,9	2,3	2,3	2,3
1f	0,4	0,9	2,3	0,9	2,3	5,5

Tabela 7: Energia (Hartree) obtida em diferentes cálculos quânticos para cada combinação de expoentes de polarização “s” do átomo de nitrogênio

	s1	s2	s3	s4	s5	s6
HF	-54,4043167	-54,4043167	-54,4043167	-54,4043167	-54,4043167	-54,4043167
B3LYP	-54,6065865	-54,6065865	-54,6065865	-54,6065865	-54,6065865	-54,6065865
MP2	-54,4928334	-54,4980355	-54,4958238	-54,4711328	-54,4714992	-54,4676383
MP4	-54,5079632	-54,5127066	-54,5100245	-54,4800217	-54,4796074	-54,4760705
CCSD	-54,5071412	-54,5117159	-54,5092486	-54,4804117	-54,4800784	-54,47661
CISD	-54,506376	-54,5109255	-54,5084842	-54,4799514	-54,47963	-54,4761766
QCISD	-54,5071668	-54,5117383	-54,5092747	-54,4804616	-54,4801312	-54,4766647

Tabela 8: Combinações de expoentes de polarização “s” para o átomo de oxigênio

	s1	s2	s3	s4	s5	s6
1d	2,3	2,3	2,3	5,5	5,5	5,5
2d	0,9	0,9	0,9	2,3	2,3	2,3
1f	0,4	0,9	2,3	0,9	2,3	5,5

Tabela 9: Energia (Hartree) obtida em diferentes cálculos quânticos para cada combinação de expoentes de polarização “s” do átomo de oxigênio

	s1	s2	s3	s4	s5	s6
HF	-74,8172069	-74,8178806	-74,8175407	-74,8164091	-74,8161368	-74,8155823
B3LYP	-75,0994332	-75,0999334	-75,0997497	-75,0994815	-75,099314	-75,098882
MP2	-74,9519303	-74,961691	-74,9617215	-74,9349618	-74,9374746	-74,9296188
MP4	-74,9677706	-74,9782992	-74,9772968	-74,9463152	-74,9478454	-74,9395124
CCSD	-74,9671583	-74,9772824	-74,9764118	-74,9465604	-74,9481614	-74,9400791
CISD	-74,9647003	-74,9746608	-74,9738537	-74,9447906	-74,9464068	-74,938423
QCISD	-74,9672597	-74,97737	-74,9764916	-74,9466807	-74,9482835	-74,9402127

Tabela 10: Combinações de expoentes de polarização “s” para o átomo de flúor

	s1	s2	s3	s4	s5	s6
1d	4,1	4,1	4,1,	9,8	9,8	9,8
2d	1,7	1,7	1,7	4,1	4,1	4,1
1f	0,7	1,7	4,1	1,7	4,1	9,8

Tabela 11: Energia (Hartree) obtida em diferentes cálculos quânticos para cada combinação de expoentes de polarização “s” do átomo de flúor

	s1	s2	s3	s4	s5	s6
HF	-99,4143489	-99,4147689	-99,4142263	-99,4131367	-99,4126605	-99,4122103
B3LYP	-99,774784	-99,7751258	-99,7747483	-99,7745217	-99,7741595	-99,7737782
MP2	-99,6010865	-99,6128094	-99,6075357	-99,5706063	-99,569732	-99,5602699
MP4	-99,6111975	-99,623736	-99,6168629	-99,5765127	-99,574446	-99,5647411
CCSD	-99,610946	-99,623105	-99,6165796	-99,5774953	-99,5756392	-99,5661545
CISD	-99,6069878	-99,6189235	-99,6126027	-99,5745751	-99,5727912	-99,563436
QCISD	-99,6111476	-99,6232722	-99,6167578	-99,5777537	-99,5759062	-99,5664399

Na segunda etapa, os expoentes “*p*” selecionados também foram combinados de seis maneiras diferentes para os átomos de boro, carbono, nitrogênio, oxigênio e flúor presentes no Apêndice e, aproveitando a *Tabela 1* novamente, pode-se visualizar melhor como exemplo a idéia geral de seleção. Então, observando a segunda coluna da *Tabela 1* (expoentes “*p*”), foram selecionados os três expoentes “*p*” anteriores ao expoente “*p*” mais

difuso (o último da coluna), logo estes expoentes foram rearranjados com todos os expoentes diferentes, depois com o expoente da função “*f*” igual ao expoente da função “*2d*” e por último fazendo o expoente da função “*f*” igual ao expoente “*1d*” conforme exposto nas colunas p1, p2 e p3 das *Tabelas 12, 14, 16, 18 e 20* nomeadas como: *Combinações de expoentes de polarização “p”* para os respectivos átomos. Da mesma forma, foram selecionados três expoentes “*p*” anteriores ao segundo expoente “*p*” mais difuso (penúltimo da coluna: expoentes “*p*” da *Tabela 1*) e então eles foram rearranjados respeitando a sequência de combinações feitas para p1, p2 e p3. Feito isto, foram criadas as combinações p4, p5 e p6 das *Tabelas 12, 14, 16, 18 e 20* e com tais combinações, os diferentes cálculos químico-quânticos foram realizados para obter a Energia Atômica de cada uma das novas funções de base expostas nas *Tabelas 13, 15, 17, 19 e 21*.

Portanto, as *Tabelas 12, 14, 16, 18 e 20*; apresentam os expoentes de polarização extraídos dos expoentes do tipo “*p*”, com os quais obteve-se os resultados de cálculos químico-quânticos expressos nas *Tabelas 13, 15, 17, 19 e 21* para os átomos da primeira fila.

Tabela 12: Combinações de expoentes de polarização “*p*” para o átomo de boro

	p1	p2	p3	p4	p5	p6
1d	0,8	0,8	0,8	2,1	2,1	2,1
2d	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3
1f	0,12	0,3	0,8	0,8	2,1	0,3

Tabela 13: Energia (Hartree) obtida em diferentes cálculos quânticos para cada combinação de expoentes de polarização “p” do átomo de boro

	p1	p2	p3	p4	p5	p6
HF	-24,5327055	-24,5327131	-24,532708	-24,5326887	-24,5326834	-24,5326949
B3LYP	-24,6652868	-24,6652892	-24,6653	-24,6652385	-24,6652392	-24,6652317
MP2	-24,5760128	-24,5776801	-24,5779	-24,5761427	-24,5744287	-24,5760893
MP4	-24,5946227	-24,5956635	-24,5956	-24,5945119	-24,5934325	-24,5946023
CCSD	-24,5968792	-24,5977983	-24,5978	-24,5968009	-24,5958474	-24,5968553
CISD	-24,5969181	-24,5978394	-24,5978	-24,5968383	-24,5958832	-24,5968929
QCISD	-24,5969313	-24,5978527	-24,5978	-24,5968513	-24,5958957	-24,5969056

Tabela 14: Combinações de expoentes de polarização “p” para o átomo de carbono

	p1	p2	p3	p4	p5	p6
1d	1,3	1,3	1,3	3,59	3,59	3,59
2d	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
1f	0,2	0,5	1,3	1,3	3,59	0,5

Tabela 15: Energia (Hartree) obtida em diferentes cálculos quânticos para cada combinação de expoentes de polarização “p” do átomo de carbono

	p1	p2	p3	p4	p5	p6
HF	-37,6931656	-37,6931715	-37,6931674	-37,6931616	-37,6931575	-37,6931667
B3LYP	-37,8611589	-37,8611601	-37,8611699	-37,861138	-37,8611427	-37,8611289
MP2	-37,7573873	-37,7607297	-37,7607025	-37,7578283	-37,7546845	-37,7584785
MP4	-37,7767805	-37,7795675	-37,7791192	-37,7770116	-37,7743748	-37,7777744
CCSD	-37,777438	-37,7800072	-37,7796905	-37,7776658	-37,7752189	-37,7783084
CISD	-37,7770423	-37,7796046	-37,7792932	-37,7772695	-37,7748287	-37,7779077
QCISD	-37,7774702	-37,7800405	-37,7797254	-37,7776972	-37,775249	-37,77834

Tabela 16: Combinações de expoentes de polarização “p” para o átomo de nitrogênio

	p1	p2	p3	p3	p5	p6
1d	1,6	1,6	1,6	4,34	4,34	4,34
2d	0,62	0,62	0,62	0,62	0,62	0,62
1f	0,25	0,62	1,6	1,6	4,34	0,62

Tabela 17: Energia (Hartree) obtida em diferentes cálculos quânticos para cada combinação de expoentes de polarização “p” do átomo de nitrogênio

	p1	p2	p3	p4	p5	p6
HF	-54,4043167	-54,4043167	-54,4043167	-54,4043167	-54,4043167	-54,4043167
B3LYP	-54,6065865	-54,6065865	-54,6065865	-54,6065865	-54,6065865	-54,6065865
MP2	-54,4952116	-54,5001939	-54,5015127	-54,496146	-54,4912756	-54,495828
MP4	-54,5120739	-54,5168468	-54,5176145	-54,5127191	-54,5078575	-54,5125277
CCSD	-54,5110184	-54,5155447	-54,5163953	-54,5116433	-54,5070212	-54,5113921
CISD	-54,5101621	-54,5146553	-54,5155092	-54,510783	-54,5061931	-54,5105298
QCISD	-54,5110463	-54,5155702	-54,5164167	-54,5116732	-54,5070549	-54,51143

Tabela 18: Combinações de expoentes de polarização “p” para o átomo de oxigênio

	p1	p2	p3	p4	p5	p6
1d	2,06	2,06	2,06	5,14	5,14	5,14
2d	0,86	0,86	0,86	0,86	0,86	0,86
1f	0,35	0,86	2,06	2,06	5,14	0,86

Tabela 19: Energia (Hartree) obtida em diferentes cálculos quânticos para cada combinação de expoentes de polarização “p” do átomo de oxigênio

	p1	p2	p3	p4	p5	p6
HF	-74,8172726	-74,817918	-74,8177215	-74,8177545	-74,8170892	-74,8179633
B3LYP	-75,0994341	-75,0999068	-75,0998283	-75,0998145	-75,0993395	-75,0999
MP2	-74,9521811	-74,9609856	-74,9629951	-74,9587893	-74,9505903	-74,95789
MP4	-74,968346	-74,9779048	-74,977632	-74,9747027	-74,9654522	-74,9743531
CCSD	-74,9676987	-74,976883	-74,9777724	-74,9738504	-74,9649527	-74,9734771
CISD	-74,965199	-74,9742303	-74,9755425	-74,9712678	-74,9625166	-74,9708618
QCISD	-74,9678051	-74,9769784	-74,9782509	-74,9739421	-74,9650545	-74,9735872

Tabela 20: Combinações de expoentes de polarização “p” para o átomo de flúor

	p1	p2	p3	p4	p5	p6
1d	2,72	2,72	2,72	7,43	7,43	7,43
2d	1,023	1,023	1,023	1,023	1,023	1,023
1f	0,4	1,023	2,72	2,72	7,43	1,023

Tabela 21: Energia (Hartree) obtida em diferentes cálculos quânticos para cada combinação de expoentes de polarização “p” do átomo de flúor

	p1	p2	p3	p4	p5	p6
HF	-99,4144358	-99,4151344	-99,4150018	-99,4148924	-99,4141852	-99,4150427
B3LYP	-99,7746114	-99,7751332	-99,7750893	-99,7750101	-99,7744785	-99,7750637
MP2	-99,6032966	-99,6149644	-99,6191134	-99,6070935	-99,5958188	-99,604988
MP4	-99,6143219	-99,6272946	-99,6308912	-99,6176476	-99,6047342	-99,615943
CCSD	-99,6135569	-99,6263714	-99,6299278	-99,6170603	-99,6045866	-99,615395
CISD	-99,6096191	-99,6218411	-99,625404	-99,6128132	-99,6006098	-99,6111161
QCISD	-99,6140835	-99,6265793	-99,6300999	-99,6172759	-99,6048257	-99,6156541

Agora, com os resultados das duas etapas, foi feita a comparação dos valores de Energia Atômica de cada um dos átomos da primeira fila da Tabela Periódica em cada um dos cálculos químico-quânticos das diferentes combinações dos expoentes de polarização obtidos nas Tabelas 3, 5, 7, 9, 11, 13, 15, 17, 19 e 21 com os valores de Energia Atômica dos respectivos átomos obtidos em cálculos químico-quânticos com a função de base pMCG-HF [2] polarizada variacionalmente, a qual foi chamada de pMCG-HF(2df), explicitando que estes conjuntos de base têm duas funções “*d*” e uma função “*f*” assim como a nomenclatura padrão para os conjuntos de base de Pople discutida nas páginas 23 e 24 desta dissertação.

Comparando-se então os valores de Energia Atômica dos átomos de boro, carbono, nitrogênio, oxigênio e flúor obtidos entre as duas etapas e a pMCG-HF(2df), ou seja, fazendo a comparação dos dados obtidos das *Tabelas 3, 5, 7, 9, 11, 13, 15, 17, 19 e 21* com os dados da *Tabela 23*, nota-se que os valores mais próximos de Energia Atômica das funções pMCG-HF(2df) são aqueles correspondentes as combinações dos expoentes “*s*” e “*p*” de polarização apresentadas como *s*₂, *s*₃, *p*₂ e *p*₃ nos métodos químico-quânticos B3LYP, MP2, CCDS e CISD. Então, as funções de base polarizadas pMCG-HF(2df), *s*₂, *s*₃, *p*₂, e *p*₃ foram aplicadas em moléculas e comparadas com dados experimentais [42] apresentados nas Tabelas seguintes (Tabela24 à Tabela47).

Tabela 22: Expoentes de polarização obtidos através do pMCG-HF(2df)

	Boro	Carbono	Nitrogênio	Oxigênio	Flúor
1d	0,3	1,1	1,7	2,3	3,2
2d	1,0	0,3	0,5	0,7	0,9
1f	0,5	0,8	1,1	1,4	1,9

Tabela 23: Energia (Hartree) obtida em diferentes cálculos quânticos para cada expoente de polarização do pMCG-HF(2df)

	Boro	Carbono	Nitrogênio	Oxigênio	Flúor
HF	-24,5327567	-37,69348	-54,4043167	-74,4400195	-99,4153213
B3LYP	-24,6653091	-37,8612148	-54,6065865	-74,66736	-99,7752487
MP2	-24,5782798	-37,7623869	-54,5032217	-74,5542869	-99,6222012
MP4	-24,5959994	-37,7817879	-54,5200587	-74,57228	-99,6345205
CCSD	-24,5981468	-37,7822745	-54,5186807	-74,5709577	-99,6334161
CISD	-24,5981899	-37,7818433	-54,5177450	-74,569747	-99,6287325
QCISD	-24,5982037	-37,7823135	-54,5187074	-74,5709815	-99,6336045

Tabela 24 Comprimento de ligação (Å) de nitrogênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando B3LYP para a molécula de N₂

N2 / B3LYP	pMCG-HF(2df)	s2	s3	p2	p3	experimental
distância	1,09059685	1,09042636	1,08923769	1,09135239	1,09034993	1,0977
energia	-109,5781326	-109,5758556	-109,5766197	-109,5762088	-109,5781197	
tempo(opt)	2' 35"	4' 20"	4' 21"	4' 15"	4' 20"	
frequência	2.447	2.447	2.454	2.440	2.450	2.359
tempo(freq)	2' 38"	3' 13"	3' 14"	3' 13"	3' 14"	

Tabela 25: Comprimento de ligação (Å) de nitrogênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando MP2 para a molécula de N₂

N2 / MP2	pMCG-HF(2df)	s2	s3	p2	p3	experimental
distância	1,11170630	1,11053164	1,10474749	1,11416713	1,10932536	1,0977
energia	-109,3733052	-109,3642016	-109,3603658	-109,3626499	-109,3720668	
tempo(opt)	6' 16"	6' 17"	6' 14"	6' 14"	6' 14"	
frequência	2.201	2.200	2.240	2.172	2.221	2.359
tempo(freq)	8' 15"	8' 15"	8' 15"	8' 14"	8' 13"	

Tabela 26: Comprimento de ligação (Å) de nitrogênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando CCSD para a molécula de N₂

N2 / CCSD	pMCG-HF(2df)	s2	s3	p2	p3	experimental
distância	1,09477886	1,09348150	1,08854459	1,09678836	1,09272384	1,0977
energia	-109,3701144	-109,3604720	-109,3560160	-109,3596457	-109,3686091	
tempo(opt)	30' 25"	19' 9"	19' 24"	33'	19' 29"	
frequência	2.430	2.432	2.464	2.405	2.446	2.359
tempo(freq)	1h 11' 59"	40'	40' 59"	17' 22"	40' 47"	

Tabela 27: Comprimento de ligação (Å) de nitrogênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando CISD para a molécula de N₂

N2 / CISD	pMCG-HF(2df)	s2	s3	p2	p3	experimental
distância	1,08708046	1,08594211	1,08159426	1,08887275	1,08531605	1,0977
energia	-109,3439397	-109,3352711	-109,3317319	-109,333867	-109,3428526	
tempo(opt)	24' 47"	24' 46"	24' 46"	24' 45"	24' 44"	
frequência	2.515	2.516	2.545	2.493	2.530	2.359
tempo(freq)	48' 19"	48' 20"	48' 16"	48' 17"	48' 17"	

Tabela 28: Comprimento de ligação (Å) de oxigênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando B3LYP para a molécula de O₂

O2 / B3LYP	pMCG-HF(2df)	s2	s3	p2	p3	experimental
distância	1,20442971	1,2052678	1,20289096	1,2060095	1,20313863	1,2075
energia	-150,3970049	-150,333986	-150,3336869	-150,3953135	-150,334317	
tempo(opt)	4' 17"	2' 40"	2' 39"	4' 32"	2' 40"	
frequência	1.636	1.622	1.625	1.633	1.627	1.580
tempo(freq)	3' 35"	2' 42"	2' 41"	3' 43"	2' 41"	

Tabela 29: Comprimento de ligação (Å) de oxigênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando MP2 para a molécula de O₂

O2 / MP2	pMCG-HF(2df)	s2	s3	p2	p3	experimental
distância	1,22139448	1,22321546	1,21440472	1,2249099	1,21552819	1,2075
energia	-150,133563	-150,123457	-150,1226450	-150,1220681	-150,125587	
tempo(opt)	3' 39"	4' 45"	3' 38"	4' 45"	3' 38"	
frequência	1.470	1.467	1.491	1.461	1.493	1.580
tempo(freq)	7' 12"	7' 12"	7' 11"	7' 10"	7' 16"	

Tabela 30: Comprimento de ligação (Å) de oxigênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando CCSD para a molécula de O₂

O2 / CCSD	pMCG-HF(2df)	s2	s3	p2	p3	experimental
distância	1,19918396	1,20080104	1,19315502	1,2021822	1,19420973	1,2075
energia	-150,1344478	-150,124419	-150,1225901	-150,1231587	-150,126042	
tempo(opt)	33' 18"	33' 17"	33' 16"	33' 20"	33' 16"	
frequência	1.671	1.670	1.688	1.666	1.690	1.580
tempo(freq)	1h 21' 49"	1h 21' 46"	1h 21' 24"	1h 22' 4"	1h 21' 28"	

Tabela 31: Comprimento de ligação (Å) de oxigênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando MP2 para a molécula de O₂

O2 / CISD	pMCG-HF(2df)	s2	s3	p2	p3	experimental
distância	1,18976799	1,18893059	1,18206544	1,1901632	1,18576877	1,2075
energia	-150,0449006	-150,095106	-150,0942386	-150,0937416	-150,038106	
tempo(opt)	12' 39"	12' 33,8"	12' 29"	12' 27"	12' 48"	
frequência	1.726	1.754	1.770	1.750	1.741	1.580
tempo(freq)	26' 16"	25' 23"	25' 16"	25' 15"	26' 25"	

Tabela 32: Comprimento de ligação (Å) de flúor, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando B3LYP para a molécula de F₂

F2 / B3LYP	pMCG-HF(2df)	s2	s3	p2	p3	experimental
distância	1,39667808	1,40135074	1,40431007	1,39855602	1,3973754	1,4119
energia	-199,609083	-199,605208	-199,60290	-199,608872	-199,607950	
tempo(opt)	2' 28"	2' 26,9"	2' 26,5"	2' 27"	2' 27,1"	
frequência	1.045	1.030	1.019	1.043	1.041	917
tempo(freq)	2' 26"	2' 25"	2' 23"	2' 26"	2' 25"	

Tabela 33: Comprimento de ligação (Å) de flúor, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando MP2 para a molécula de F₂

F2 / MP2	pMCG-HF(2df)	s2	s3	p2	p3	experimental
distância	1,39728085	1,39370395	1,40157975	1,40064618	1,39704215	1,4119
energia	-199,307865	-199,2822096	-199,2672176	-199,2940528	-199,3002595	
tempo(opt)	3' 42"	3' 42"	3' 40"	3' 41"	3' 41"	
frequência	1.009	999	966	1.007	1.002	917
tempo(freq)	6' 24"	6' 24"	6' 22"	6' 23"	6' 24"	

Tabela 34: Comprimento de ligação (Å) de flúor, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando CCSD para a molécula de F₂

F2 / CCSD	pMCG-HF(2df)	s2	s3	p2	p3	experimental
distância	1,39298124	1,39057793	1,39809410	1,39651531	1,39292902	1,4119
energia	-199,31111080	-199,2866053	-199,2695819	-199,2996741	-199,3034508	
tempo(opt)	35' 31"	29' 16"	29' 19"	37' 16"	29' 19"	
frequência	1.011	998	965	1.008	1.003	917
tempo(freq)	39' 24"	1h 23' 23"	1h 21' 12"	1 h 21' 37"	1h 22' 35"	

Tabela 35: Comprimento de ligação (Å) de flúor, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando CISD para a molécula de F₂

F2 / CISD	pMCG-F(2df)	s2	s3	p2	p3	experimental
distância	1,36858181	1,36619182	1,37206518	1,37215323	1,36839146	1,4119
energia	-199,2738476	-199,2525629	-199,2369149	-199,2613192	-199,2671691	
tempo(opt)	21' 2"	21' 1"	21' 1"	21'	20' 58"	
frequência	1.111	1.103	1.075	1.107	1.104	917
tempo(freq)	45' 11"	45' 8"	45' 6"	45' 7"	45' 12"	

Tabela 36: Comprimento de ligação (Å) de carbono e oxigênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando B3LYP para a molécula de CO

CO / B3LYP	pMCG-HF(2df)	s2	s3	p2	p3	experimental
distância	1,12501024	1,12522874	1,12421411	1,12505211	1,12389334	1,12830
energia	-113,3674904	-113,3659232	-113,3668558	-113,3664675	-113,3675310	
tempo(opt)	3' 45"	3' 45"	3' 46"	3' 45"	3' 45"	
frequência	2.210	2.210	2.215	2.210	2.216	2.170
tempo(freq)	3' 17"	3' 17"	3' 16"	3' 18"	3' 16"	

Tabela 37: Comprimento de ligação (Å) de carbono e oxigênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando MP2 para a molécula de CO

CO/MP2	pMCG-HF(2df)	s2	s3	p2	p3	experimental
Distância	1,13688201	1,1365314	1,13216132	1,13680328	1,13217161	1,12830
Energia	-113,1516230	-113,1446312	-113,1468074	-113,1446009	-113,148858	
tempo(opt)	7' 54"	7' 53"	7' 55"	7' 53"	7' 54"	
Frequência	2.123	2.128	2.152	2.124	2.152	2.170
tempo(freq)	15' 48"	15' 46"	15' 45"	15' 47"	15' 46"	

Tabela 38: Comprimento de ligação (Å) de carbono e oxigênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando MP2 para a molécula de CO

CO / CCSD	pMCG-HF(2df)	s2	s3	p2	p3	experimental
Distância	1,12700918	1,12672645	1,12253280	1,12702123	1,1225868	1,12830
Energia	-113,1537673	-113,1467077	-113,1482823	-113,1470108	-113,1508125	
tempo(opt)	45'	45'	44' 53"	23' 38"	45' 40"	
Frequência	2.226	2.231	2.255	2.227	2.254	2.170
tempo(freq)	2h 21' 12"	2h 22' 47"	2h 17' 58"	2h 21' 48"	2h 20' 13"	

Tabela 39: Comprimento de ligação (Å) de carbono e oxigênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando CISD para a molécula de CO

CO / CISD	pMCG-HF(2df)	s2	s3	p2	p3	experimental
distância	1,12082501	1,12072827	1,11689288	1,12093985	1,11687921	1,12830
energia	-113,1299040	-113,1234651	-113,1254096	-113,1236238	-113,1276638	
tempo(opt)	34' 37"	34' 34"	34' 38"	34' 29"	34' 27"	
frequência	2.280	2.283	2.305	2.279	2.304	2.170
tempo(freq)	1h 30' 51"	1h 30' 26"	1h 30' 27"	1h 30' 28"	1h 30' 16"	

Tabela 40: Comprimento de ligação (Å) de nitrogênio e oxigênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando B3LYP para a molécula de NO

NO / B3LYP	pMCG-HF(2df)	s2	s3	p2	p3	experimental
distância	1,14506724	1,14535497	1,14347263	1,14626042	1,14435609	1,15080
energia	-129,9532502	-129,9510919	-129,9514096	-129,9516630	-129,9528309	
tempo(opt)	6' 35"	6' 35"	6' 35"	6' 35"	6' 35"	
frequência	1.971	1.970	1.976	1.967	1.976	1.904
tempo(freq)	4' 39"	4' 39"	4' 38"	4' 39"	4' 39"	

Tabela 41: Comprimento de ligação (Å) de nitrogênio e oxigênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando MP2 para a molécula de NO

NO/MP2	pMCG-HF(2df)	s2	s3	p2	p3	experimental
distância	1,13579903	1,1358005	1,13496206	1,1360109	1,13513745	1,15080
energia	-129,7128442	-129,708605	-129,7096627	-129,7074629	-129,710500	
tempo(opt)	22' 12"	22' 18"	22' 12"	22' 59"	22' 4"	
frequência		3.320	3.201	3.335	3.226	1.904
tempo(freq)	19' 50"	19' 49"	19' 49"	19' 49"	19' 48"	

Tabela 42: Comprimento de ligação (Å) de nitrogênio e oxigênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando CCSD para a molécula de NO

NO / CCSD	pMCG-HF(2df)	s2	s3	p2	p3	experimental
distância	1,14559635	1,14582331	1,14276673	1,14633991	1,1433794	1,15080
energia	-129,7122025	-129,7079193	-129,7092967	-129,7067229	-129,7100809	
tempo(opt)	26' 10"	26' 18"	26' 24"	26' 45"	26' 35"	
frequência	1.991	1.990	2.000	1.987	2.000	1.904
tempo(freq)	1h 31' 49"	1h 30' 8"	1h 30'	1h 31' 19"	1h 30' 25"	

Tabela 43: Comprimento de ligação (Å) de nitrogênio e oxigênio, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando MP2 para a molécula de NO

NO / CISD	pMCG-HF(2df)	s2	s3	p2	p3	experimental
distância	1,13227	1,13248	1,13053	1,13282	1,13093	1,15080
energia	-129,6885545	-129,6849295	-129,6855271	-129,6838939	-129,6864833	
tempo(opt)	23' 11"	22' 48"	22' 54"	22' 50"	22' 50"	
frequência	2.411	2.419	2.365	2.425	2.377	1.904
tempo(freq)	49' 7"	49' 29"	48' 24"	49' 23"	48' 39"	

Tabela 44: Comprimento de ligação (Å) de boro e flúor, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando B3LYP para a molécula de BF₃

BF3 / B3LYP	pMCG-HF(2df)	s2	s3	p2	p3	experimental
Distância	1,3138	1,3128	1,3109	1,3140	1,3134	1,313
Energia	-324,7309576	-324,7277474	-324,7261173	-324,7294976	-324,7303621	
tempo(opt)	12' 43"	12' 44"	12' 13"	13' 4"	12' 31"	
Frequência						
E'	474	474	480	474	475	480
A2"	683	681	684	683	682	691
A1	886	887	892	885	888	888
E'	1.445	1.445	1.452	1.443	1.448	1.449
tempo(freq)	13' 21"		12' 22"	13'47"	13' 5"	

Tabela 45: Comprimento de ligação (Å) de boro e flúor, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando MP2 para a molécula de BF₃

BF3/MP2	pMCG-HF(2df)	s2	s3	p2	p3	experimental
Distância	1,3130	1,3061	1,3061	1,3144	1,3101	1,313
Energia	-324,2190024	-324,197018	-324,1970181	-324,1972930	-324,210725	
tempo(opt)	18' 19"	18' 5"	17' 7"	18' 37"	17' 46"	
Frequência						
E'	481	487	497	477	487	480
A2"	696	705	707	688	699	691
A1	894	910	917	891	902	888
E'	1.472	1497	1509	1470	1488	1.449
tempo(freq)	1h 10' 32"	1h 9' 54"	1h 8' 32"	1h 11' 3"	1h 10' 18"	

Tabela 46: Comprimento de ligação (Å) de boro e flúor, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando CCSD para a molécula de BF₃

BF3 / CCSD	pMCG-HF(2df)	s2	s3	p2	p3	experimental
Distância	1,3079	1,3014	1,2975	1,3094	1,3051	1,313
Energia	-324,2181369	-324,1965704	-324,1663404	-324,1972275	-324,2094653	
tempo(opt)	9h 94' 26"	9h 30' 48"	9h 20' 5"	9h 33' 55"	9h 28' 38"	
Frequência						
E'	488	494	503	484	494	480
A2"	705	714	715	697	708	691
A1	909	924	930	906	917	888
E'	1.499	1.521	1.532	1.496	1.513	1.449
tempo(freq)	1dia 8h 59' 55"	1dia 8h 36' 49"	1dia 8h 0' 8"	1dia 8h 49' 10"	1dia 8h 15'	

Tabela 47: Comprimento de ligação (Å) de boro e flúor, Energia Eletrônica (Hartree) e tempo de otimização, frequência (cm⁻¹) e tempo para o cálculo da frequência utilizando CISD para a molécula de BF₃

BF3 / CISD	pMCG-HF(2df)	s2	s3	p2	p3	experimental
Distância	1,3002	1,2950	1,2914	1,3015	1,2978	1,313
energia	-324,1255718	-324,1098154	-324,0851996	-324,1068060	-324,1199366	
tempo(opt)	5h 11' 55"	6h 26' 44"	6h 16' 25"	5h 16' 15"	5h 9' 24"	
Frequência						
E'	498	503	512	496	503	480
A2"	719	726	728	714	722	691
A1'	932	943	950	929	938	888
E'	1.533	1.551	1.561	1.530	1.546	1.449
tempo(freq)	14h 11' 47"	14h 6' 6"	13h 52' 26"	14h 23' 40"	14h 11' 29"	

A partir dos resultados apresentados nas *Tabelas 24 a 47*, pode-se notar que as combinações p2 e p3 são as que apresentam, em geral, os melhores resultados para as propriedades estudadas, ou seja, energia total, distância de ligação e frequência vibracional, para a maioria dos métodos de cálculo empregados (B3LYP, MP2, CISD e CCSD).

Como o parâmetro geométrico, distância de ligação, é bem descrito neste trabalho com qualquer método químico-quântico e a diferença nos cálculos com diferentes combinações de expoentes de polarização não apresentam variações significativas, não foi possível, a partir dos resultados de distância de ligação, concluir quais das combinações de expoentes de polarização seria a mais adequada para ser usada como uma regra geral.

As melhores energias totais para as moléculas estudadas são obtidas com a combinação p3. No entanto, observamos que a diferença existente entre as combinações p2 e p3 é bem pequena, pois os dois expoentes de polarização “d” para ambas são iguais, a única diferença reside no expoente de polarização “f”, este expoente em p2 é igual ao expoente da segunda função “d” e em p3 é igual ao expoente da primeira função “d”. Na prática, esta diferença é sutil, pois comparando os resultados mostrados nas *Tabelas 24 a 47*, para um conjunto de moléculas diatômicas e BF₃, nota-se que as combinações p2 e p3 possuem valores relativamente próximos para as energias totais, porém p3 calcula sempre energias levemente melhores que p2. Para o caso das frequências vibracionais, p2 e p3 se alternam com relação aos melhores resultados; portanto, no geral, p3 mostrou um melhor desempenho na descrição das propriedades moleculares aqui estudadas.

Capítulo V: Conclusões

A partir dos resultados obtidos neste trabalho, foi possível concluir, que as bases obtidas com o pMCG-HF podem ser polarizadas sem a necessidade de otimização de expoentes, já que isto é um tratamento bastante laborioso. Os expoentes de polarização devem ser sempre escolhidos dos expoentes “p” da base primitiva, para os átomos da primeira e segunda filas da tabela periódica, a partir do seguinte critério para uma polarização 2df:

- a) o primeiro expoente de polarização “d” é escolhido como sendo o terceiro expoente anterior ao expoente primitivo “p” mais difuso;
- b) escolhe-se o segundo expoente de polarização “d” como sendo o segundo expoente anterior ao expoente primitivo “p” mais difuso;
- c) o primeiro expoente de polarização “f” é escolhido como sendo igual ao primeiro expoente de polarização “d”.

Esta regra pode ser também seguida para o caso de uma polarização maior da base primitiva como, por exemplo, 3df ou 3d2f. Para isto, basta apenas flexibilizar o critério descrito acima.

Vale aqui acrescentar que se a base primitiva for flexível, ou seja, não muito truncada ou muito contraída, não é necessário carregar no número de funções de polarização, já que um maior número de funções de polarização tende também a corrigir

problemas de truncamento e contração de bases, pois bases primitivas pequenas ou muito contraídas geralmente não descrevem adequadamente a energia total da molécula, assim como outras propriedades moleculares tais como , por exemplo, a frequência vibracional. Portanto, para as bases geradas pelo pMCG-HF, envolvendo os átomos da primeira e da segunda filas da tabela periódica, algo como 2df, ou no máximo 3d2f, poderá ser um número de funções de polarização suficiente para descrever de forma satisfatória qualquer molécula que possa ser estudada.

Também é possível concluir deste trabalho, que funções de polarização difusas podem ser escolhidas dos expoentes primitivos “p”, sendo apenas necessário escolher expoentes “p” da base primitiva menores que 1, pois a inclusão desses expoentes faz com que a função de base passe a descrever de forma mais adequada os sistemas moleculares aniônicos e as propriedades relacionadas às ligações fracas em sistemas moleculares.

Referências Bibliográficas

- [1] BARBOSA, R. C.; DA SILVA, A.B.F. A new proposal for the discretization of the Griffin-Wheeler-Hartree-Fock equations. **Molecular Physics**, v. 101, n. 8, p. 1073-1077, 2003.
- [2] COMAR JUNIOR, Moacyr. **Geração de conjuntos de base gaussianos contraídos e polarizados para átomos da primeira fila da tabela periódica para aplicação em cálculos ab initio de propriedades atômicas e moleculares**. 2005. 86f. Tese (Doutorado em Físico-Química) - Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2005.
- [3] HONÓRIO, K. M.; DA SILVA, A. B. F. A study on the influence of molecular properties in the psychoactivity of cannabinoid compounds **Journal of Molecular Modeling**, v. 11, n. 3, p. 200-209, 2005.
- [4] HAGLER, A. T.; HULER, E.; LIFSON, S. Energy functions for peptides and proteins. I. Derivation of a consistent force field including the hydrogen bond from amide crystals. **Journal of the American Chemical Society**, v. 96, n. 17, p. 5319-5327, 1974.
- [5] ROSSO, K. M.; DUPUIS, M.; VALIEV, M. Molecular computational investigation of electron-transfer kinetics across cytochrome-iron oxide interfaces. **Journal of Physical Chemistry C**, v. 111, n. 30, p. 11363-11375, 2007.
- [6] ZHENG, J.; ZHAO, Y.; TRUHLAR, D. G. Thermochemical kinetics of hydrogen-atom transfers between methyl, methane, ethynyl, ethyne, and hydrogen. **Journal of Physical Chemistry A**, v. 111, n. 21, p. 4632-4642, 2007.
- [7] HARTREE, D.R. Part I-Theory and methods: The wave mechanics of an atom with a non-coulomb central field. **Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society**, v. 24, n. 1, p. 89-110, 1928.
- [8] ROOTHAN, C.C.J. New developments in molecular orbital theory. **Reviews of Modern Physics**, v. 23, n. 2, p. 69-89, 1951.
- [9] FOCK, V. Näherungsmethode zur lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems. **Zeitschrift für Physik A: Hadrons and Nuclei**, v. 61, n. 2, p. 146-167, 1930

- [10] SLATER, J.C. Atomic shielding constants. **Physical Review**, v. 36, n. 1, p. 57-64, 1930.
- [11] BOYS, S.F. Electronic wave functions. I: A general method of calculation for the stationary states of any molecular system. **Proceedings of the Royal Society**, v. 200, n. 1063, p. 542-554, 1950.
- [12] SHAVIT, I.; KARPLUS, M. Gaussian-transform method for molecular integrals: I. Formulation for energy integrals. **Journal of Chemical Physics**, v. 43, n. 2, p. 398-414, 1965.
- [13] DA SILVA, A.B.F. **Bases universais geradas pelo método da coordenada geradora Hartree-Fock e suas aplicações em cálculos de propriedades atômicas e moleculares**. 1990. 136f. Tese (Doutorado em Físico-Química) - Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 1990.
- [14] KRISHMAN, R.; BINKLEY, J. S.; SEEGER, R.; POPLE, J. Self-consistent molecular orbital methods: XX. A basis set for correlated wave functions. **Journal of Chemical Physics**, v. 72, n. 1, p. 650-654 1980.
- [15] WILSON, A.K.; VANMOURIK, T; DUNNING, T.H. Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations: VI. Sextuple zeta correlation consistent basis sets for boron through neon. **Journal of Molecular Structure-Theochem**, v. 388, p. 339-349, 1996.
- [16] EASTON, R. E.; GIESEN, D.J.; WELCH, A.; CRAMER, C.J.; TRUHLAR, D.G. The MIDI! basis set for quantum mechanical calculations of molecular geometries and partial charges. **Theoretica Chimica Acta**, v. 93, n. 5, p. 281-301, 1996.
- [17] LI, J.; CRAMER, C.J.; TRUHLAR, D.G. MIDI! basis set for silicon, bromine, and iodine. **Theoretica Chimica Acta**, v. 99, n. 3, p. 192-196, 1998.
- [18] CRAMER, C.J. **Essentials of Computational Chemistry: theories and models**. New York: Jhon Wiley, 2002. 542p.
- [19] SZABOO, A.; OSTLUND, N.S. **Modern quantum chemistry: introduction to advanced electronic structure theory**. New York: Dover Publications, 1996. 466p.
- [20] MULLER, M., **Fundamentals of quantum chemistry: molecular spectroscopy and modern electronic structure computations**. New York: Kluwer Academic Publishers, 2002. 265p.
- [21] LEVINE, I.N. **Química cuántica**. Madrid: Pearson Educación, 2001. 736p.

- [22] ELSASSER, W.M. Sur le principe de Pauli dans les noyaux. **Journal Physique Radium**, v. 4, n. 10, p. 549-556, 1933.
- [23] ELSASSER, W. M. Sur le principe de Pauli dans les noyaux II. **Journal Physique Radium**, v. 5, n. 8, p. 389-397, 1934.
- [24] GUGGENHEIMER, K. Remarques sur la constitution des noyaux atomiques I. **Journal Physique Radium**, v. 5, n. 6, p. 253-256, 1934.
- [25] JOHNSON, K.E., Independent-particle models of the nucleus in the 1930s. **American Journal of Physics**, v. 60, n. 2, p. 164-172, 1992.
- [26] OLDENBERG, O.; HOLLADAY, W.G. **Introdução à física atômica e nuclear**. São Paulo: Edgard Blücher, 1971. 384p.
- [27] MAYER, M.G.; JENSEN, H.D., **Elementary theory of nuclear shell structure: structure of matter series**. New York: Wiley. 1955. 269p
- [28] BOHR, N., Neutron capture and nuclear constitution. **Nature**, v. 137, n. 3461, p. 344-348, 1936.
- [29] ALMEIDA, E.;TAUHATA, L, **Física nuclear**. Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 1981. 413p.
- [30] BOHR, N.; WHEELER, J.A. The mechanism of nuclear fission. **Physical Review**, v. 56, n. 5, p. 426-450, 1939.
- [31] GRIFFIN, J.J.; WHEELER, J.A. collective motions in nuclei by the method of generator coordinates. **Physical Review**, v. 108, n. 2, p. 311-327, 1957.
- [32] HILL, D.L.; WHEELER, J.A. nuclear constitution and the interpretation of fission phenomena. **Physical Review**, v. 89, n. 5, p. 1102-1145, 1953.
- [33] CHATTOPADHYAY, P.; DREIZLER, R.; TRSIC, M.; FINK, M. Illustration of the generator coordinate method in terms of model problems. **Zeitschrift für Physik A: Hadrons and Nuclei**, v. 285, n. 1, p. 7-16, 1978.
- [34] MOHALLEM, J.R. A further study on the discretisation of the Griffin-Hill-Wheeler equation. **Zeitschrift für Physik D: Atoms**, v. 3, n. 4, p. 339-344, 1986.
- [35] LATHOUWERS, L., The generator coordinate representation in an natural state formalism. **Annals of Physics**, v. 102, n. 2, p. 347-370, 1976.

[36] GALETTI, D.; DE TOLEDO PIZA, A.F.R. Numerical treatment of the Griffin-Hill-Wheeler equation. **Physical Review C**, v. 17, n. 2, p. 774-776. 1978.

[37] TRSIC, M.; DA SILVA, A.B.F. **Electronic atomic and molecular calculations: applying the generator coordinate method**. Amsterdam: Elsevier, 2007. 306p.

[38] DA SILVA, A.B.F.; DA COSTA, H.F.M.; TRSIC, M. Universal gaussian and Slater-type bases for atoms H to Xe based on the generator coordinate Hartree-Fock method: I. ground and certain low-lying excited states of the neutral atoms. **Molecular Physics**, v. 68, n. 2, p.433 - 445, 1989.

[39] DA SILVA, A.B.F.; TRSIC, M. Gaussian- and Slater-type bases for ground and certain low-lying excited states of positive and negative ions of the atoms H through Xe based on the generator coordinate Hartree-Fock method. **Canadian Journal of Chemistry**, v. 74, p. 1526-1534, 1996.

[40] DA COSTA, H.F.M.; TRSIC, M.; DA SILVA, A.B.F.; SIMAS, A.M. On the implicit integral character of Roothan's expansion. **The European Physical Journal D**, v. 5, n. 3, p. 375-379, 1999.

[41] FRISCH, M. J.; TRUCKS, G. W.; SCHLEGEL, H. B.; SCUSERIA, G. E.; ROBB, M. A.; CHEESEMAN, J. R.; MONTGOMERY, Jr., J. A.; VREVEN, T.; KUDIN, K. N.; BURANT, J. C.; MILLAM, J. M.; IYENGAR, S. S.; TOMASI, J.; BARONE, V.; MENNUCCI, B.; COSSI, M.; SCALMANI, G.; REGA, N.; PETERSON, G. A.; NAKATSUJI, H.; HADA, M.; EHARA, M.; TOYOTA, K.; FUKUDA, R.; HASEGAWA, J.; ISHIDA, M.; NAKAJIMA, T.; HONDA, Y.; KITAO, O.; NAKAI, H.; KLENE, M.; LI, X.; KNOX, J. E.; HRATCHIAN, H. P.; CROSS, J. B.; BAKKEN, V.; ADAMO, C.; JARAMILLO, J.; GOMPERS, R.; STRATMANN, R. E.; YAZYEV, O.; AUSTIN, A. J.; CAMMI, R.; POMELLI, C.; OCHTERSKI, J. W.; AYALA, P. Y.; MOROKUMA, K.; VOTH, G. A.; SALVADOR, P.; DANNENBERG, J. J.; ZAKRZEWSKI, V. G.; DAPPRICH, S.; DANIELS, A. D.; STRAIN, M. C.; FARKAS, O.; MALICK, D. K.; RABUCK, A. D.; RAGHAVACHARI, K.; FORESMAN, J. B.; ORTIZ, J. V.; CUI, Q.; BABOUL, A. G.; CLIFFORD, S.; CIOSLOWSKI, J.; STEFANOV, B. B.; LIU, G.; LIASHENKO, A.; PISKORZ, P.; KOMAROMI, I.; MARTIN, R. L.; FOX, D. J.; KEITH, T.; AL-LAHAM, M. A.; PENG, C. Y.; NANAYAKKARA, A.; CHALLACOMBE, M.; GILL, P. M. W.; JOHNSON, B.; CHEN, W.; WONG, M. W.; GONZALEZ, C.; and POPLE, J. A.; **Gaussian 03**: revision C.02. Wallingford: 2004.

[42] DAVID, R.L. **CRC handbook of chemistry and physics**. New York: CRC, 1998. p. 2496.

[43] KOCH, W.; HOLTHAUSEN, M.C. **A chemist's guide to density functional theory**. Weinheim: WILEY, 2001. 293p.

APÊNDICE

Conjuntos de base, para os átomos estudados nesta dissertação, já polarizados com as diferentes combinações de funções de polarização s1, s2, s3, s4, s5, s6, p1, p2, p3, p4, p5 e p6.

Os nomes átomo_s1, átomo_s2, átomo_s3, átomo_s4, átomo_s5, átomo_s6, átomo_p1, átomo_p2, átomo_p3, átomo_p4, átomo_p5 e átomo_p6 foram dados conforme à variação dos expoentes primitivos “s” e “p” para as funções de polarização “d” e “f”.

<i>Átomo de Boro s1</i>	<i>Átomo de Boro s2</i>	<i>Átomo de Boro s3</i>
B 0	B 0	B 0
s 8 1.0	s 8 1.0	s 8 1.0
.2963368E+05 .6325723E-04	.2963368E+05 .6325723E-04	.2963368E+05 .6325723E-04
.4836871E+04 .4832876E-03	.4836871E+04 .4832876E-03	.4836871E+04 .4832876E-03
.1038442E+04 .2729272E-02	.1038442E+04 .2729272E-02	.1038442E+04 .2729272E-02
.2932504E+03 .1089986E-01	.2932504E+03 .1089986E-01	.2932504E+03 .1089986E-01
.9801330E+02 .3599670E-01	.9801330E+02 .3599670E-01	.9801330E+02 .3599670E-01
.3599506E+02 .1008751E+00	.3599506E+02 .1008751E+00	.3599506E+02 .1008751E+00
.1392611E+02 .2158413E+00	.1392611E+02 .2158413E+00	.1392611E+02 .2158413E+00
.5676043E+01 .2659000E+00	.5676043E+01 .2659000E+00	.5676043E+01 .2659000E+00
s 5 1.0	s 5 1.0	s 5 1.0
.9801330E+02 .1078677E-03	.9801330E+02 .1078677E-03	.9801330E+02 .1078677E-03
.3599506E+02 .1006028E-02	.3599506E+02 .1006028E-02	.3599506E+02 .1006028E-02
.1392611E+02 .6465071E-02	.1392611E+02 .6465071E-02	.1392611E+02 .6465071E-02
.5676043E+01 .2820968E-01	.5676043E+01 .2820968E-01	.5676043E+01 .2820968E-01
.2460468E+01 .7621946E-01	.2460468E+01 .7621946E-01	.2460468E+01 .7621946E-01
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
1.11698337 1.00000	1.11698337 1.00000	1.11698337 1.00000
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
.47947906 1.00000	.47947906 1.00000	.47947906 1.00000
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
.19461962 1.000000	.19461962 1.000000	.19461962 1.000000
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
.07469605 1.000000	.07469605 1.000000	.07469605 1.000000
p 4 1.0	p 4 1.0	p 4 1.0
55.58795653 .00090945	55.58795653 .00090945	55.58795653 .00090945
17.93395588 .00451143	17.93395588 .00451143	17.93395588 .00451143
6.03880519 .02120740	6.03880519 .02120740	6.03880519 .02120740
2.12229366 .07822216	2.12229366 .07822216	2.12229366 .07822216
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
0.77846568 1.0000	0.77846568 1.0000	0.77846568 1.0000
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
.29802521 1.000000	.29802521 1.000000	.29802521 1.000000
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
.11908198 1.00000	.11908198 1.00000	.11908198 1.00000
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
.04966137 1.0000000	.04966137 1.0000000	.04966137 1.0000000
d 1 1.0	d 1 1.0	d 1 1.0
1.11698337 1.00000	1.11698337 1.00000	1.11698337 1.00000
d 1 1.0	d 1 1.0	d 1 1.0
.47947906 1.00000	.47947906 1.00000	.47947906 1.00000
f 1 1.0	f 1 1.0	f 1 1.0
.19461962 1.00000	.47947906 1.00000	1.11698337 1.00000

Átomo de Boro s4	Átomo de Boro s5	Átomo de Boro s6
B 0	B 0	B 0
s 8 1.0	s 8 1.0	s 8 1.0
.2963368E+05 .6325723E-04	.2963368E+05 .6325723E-04	.2963368E+05 .6325723E-04
.4836871E+04 .4832876E-03	.4836871E+04 .4832876E-03	.4836871E+04 .4832876E-03
.1038442E+04 .2729272E-02	.1038442E+04 .2729272E-02	.1038442E+04 .2729272E-02
.2932504E+03 .1089986E-01	.2932504E+03 .1089986E-01	.2932504E+03 .1089986E-01
.9801330E+02 .3599670E-01	.9801330E+02 .3599670E-01	.9801330E+02 .3599670E-01
.3599506E+02 .1008751E+00	.3599506E+02 .1008751E+00	.3599506E+02 .1008751E+00
.1392611E+02 .2158413E+00	.1392611E+02 .2158413E+00	.1392611E+02 .2158413E+00
.5676043E+01 .2659000E+00	.5676043E+01 .2659000E+00	.5676043E+01 .2659000E+00
s 5 1.0	s 5 1.0	s 5 1.0
.9801330E+02 .1078677E-03	.9801330E+02 .1078677E-03	.9801330E+02 .1078677E-03
.3599506E+02 .1006028E-02	.3599506E+02 .1006028E-02	.3599506E+02 .1006028E-02
.1392611E+02 .6465071E-02	.1392611E+02 .6465071E-02	.1392611E+02 .6465071E-02
.5676043E+01 .2820968E-01	.5676043E+01 .2820968E-01	.5676043E+01 .2820968E-01
.2460468E+01 .7621946E-01	.2460468E+01 .7621946E-01	.2460468E+01 .7621946E-01
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
1.11698337 1.00000	1.11698337 1.00000	1.11698337 1.00000
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
.47947906 1.00000	.47947906 1.00000	.47947906 1.00000
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
.19461962 1.000000	.19461962 1.000000	.19461962 1.000000
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
.07469605 1.000000	.07469605 1.000000	.07469605 1.000000
p 4 1.0	p 4 1.0	p 4 1.0
55.58795653 .00090945	55.58795653 .00090945	55.58795653 .00090945
17.93395588 .00451143	17.93395588 .00451143	17.93395588 .00451143
6.03880519 .02120740	6.03880519 .02120740	6.03880519 .02120740
2.12229366 .07822216	2.12229366 .07822216	2.12229366 .07822216
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
0.77846568 1.0000	0.77846568 1.0000	0.77846568 1.0000
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
.29802521 1.000000	.29802521 1.000000	.29802521 1.000000
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
.11908198 1.00000	.11908198 1.00000	.11908198 1.00000
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
.04966137 1.0000000	.04966137 1.0000000	.04966137 1.0000000
d 1 1.0	d 1 1.0	d 1 1.0
2.460468 1.00000	2.460468 1.00000	2.460468 1.00000
d 1 1.0	d 1 1.0	d 1 1.0
1.11698337 1.00000	1.11698337 1.00000	1.11698337 1.00000
f 1 1.0	f 1 1.0	f 1 1.0
.19461962 1.00000	1.11698337 1.00000	2.460468 1.00000

Átomo de Boro p1		Átomo de Boro p2		Átomo de Boro p3	
B 0		B 0		B 0	
s 8 1.0		s 8 1.0		s 8 1.0	
.2963368E+05	.6325723E-04	.2963368E+05	.6325723E-04	.2963368E+05	.6325723E-04
.4836871E+04	.4832876E-03	.4836871E+04	.4832876E-03	.4836871E+04	.4832876E-03
.1038442E+04	.2729272E-02	.1038442E+04	.2729272E-02	.1038442E+04	.2729272E-02
.2932504E+03	.1089986E-01	.2932504E+03	.1089986E-01	.2932504E+03	.1089986E-01
.9801330E+02	.3599670E-01	.9801330E+02	.3599670E-01	.9801330E+02	.3599670E-01
.3599506E+02	.1008751E+00	.3599506E+02	.1008751E+00	.3599506E+02	.1008751E+00
.1392611E+02	.2158413E+00	.1392611E+02	.2158413E+00	.1392611E+02	.2158413E+00
.5676043E+01	.2659000E+00	.5676043E+01	.2659000E+00	.5676043E+01	.2659000E+00
s 5 1.0		s 5 1.0		s 5 1.0	
.9801330E+02	.1078677E-03	.9801330E+02	.1078677E-03	.9801330E+02	.1078677E-03
.3599506E+02	.1006028E-02	.3599506E+02	.1006028E-02	.3599506E+02	.1006028E-02
.1392611E+02	.6465071E-02	.1392611E+02	.6465071E-02	.1392611E+02	.6465071E-02
.5676043E+01	.2820968E-01	.5676043E+01	.2820968E-01	.5676043E+01	.2820968E-01
.2460468E+01	.7621946E-01	.2460468E+01	.7621946E-01	.2460468E+01	.7621946E-01
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
1.11698337	1.00000	1.11698337	1.00000	1.11698337	1.00000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
.47947906	1.00000	.47947906	1.00000	.47947906	1.00000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
.19461962	1.000000	.19461962	1.000000	.19461962	1.000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
.07469605	1.000000	.07469605	1.000000	.07469605	1.000000
p 4 1.0		p 4 1.0		p 4 1.0	
55.58795653	.00090945	55.58795653	.00090945	55.58795653	.00090945
17.93395588	.00451143	17.93395588	.00451143	17.93395588	.00451143
6.03880519	.02120740	6.03880519	.02120740	6.03880519	.02120740
2.12229366	.07822216	2.12229366	.07822216	2.12229366	.07822216
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
0.77846568	1.0000	0.77846568	1.0000	0.77846568	1.0000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.29802521	1.00000	.29802521	1.00000	.29802521	1.00000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.11908198	1.00000	.11908198	1.00000	.11908198	1.00000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.04966137	1.00000	.04966137	1.00000	.04966137	1.00000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
0.8	1.00000	0.8	1.00000	0.8	1.00000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
0.3	1.00000	0.3	1.00000	0.3	1.00000
f 1 1.0		f 1 1.0		f 1 1.0	
0.12	1.00000	0.3	1.00000	0.8	1.00000

Átomo de Boro p4		Átomo de Boro p5		Átomo de Boro p6	
B 0		B 0		B 0	
s 8 1.0		s 8 1.0		s 8 1.0	
.2963368E+05	.6325723E-04	.2963368E+05	.6325723E-04	.2963368E+05	.6325723E-04
.4836871E+04	.4832876E-03	.4836871E+04	.4832876E-03	.4836871E+04	.4832876E-03
.1038442E+04	.2729272E-02	.1038442E+04	.2729272E-02	.1038442E+04	.2729272E-02
.2932504E+03	.1089986E-01	.2932504E+03	.1089986E-01	.2932504E+03	.1089986E-01
.9801330E+02	.3599670E-01	.9801330E+02	.3599670E-01	.9801330E+02	.3599670E-01
.3599506E+02	.1008751E+00	.3599506E+02	.1008751E+00	.3599506E+02	.1008751E+00
.1392611E+02	.2158413E+00	.1392611E+02	.2158413E+00	.1392611E+02	.2158413E+00
.5676043E+01	.2659000E+00	.5676043E+01	.2659000E+00	.5676043E+01	.2659000E+00
s 5 1.0		s 5 1.0		s 5 1.0	
.9801330E+02	.1078677E-03	.9801330E+02	.1078677E-03	.9801330E+02	.1078677E-03
.3599506E+02	.1006028E-02	.3599506E+02	.1006028E-02	.3599506E+02	.1006028E-02
.1392611E+02	.6465071E-02	.1392611E+02	.6465071E-02	.1392611E+02	.6465071E-02
.5676043E+01	.2820968E-01	.5676043E+01	.2820968E-01	.5676043E+01	.2820968E-01
.2460468E+01	.7621946E-01	.2460468E+01	.7621946E-01	.2460468E+01	.7621946E-01
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
1.11698337	1.00000	1.11698337	1.00000	1.11698337	1.00000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
.47947906	1.00000	.47947906	1.00000	.47947906	1.00000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
.19461962	1.000000	.19461962	1.000000	.19461962	1.000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
.07469605	1.000000	.07469605	1.000000	.07469605	1.000000
p 4 1.0		p 4 1.0		p 4 1.0	
55.58795653	.00090945	55.58795653	.00090945	55.58795653	.00090945
17.93395588	.00451143	17.93395588	.00451143	17.93395588	.00451143
6.03880519	.02120740	6.03880519	.02120740	6.03880519	.02120740
2.12229366	.07822216	2.12229366	.07822216	2.12229366	.07822216
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
0.77846568	1.0000	0.77846568	1.0000	0.77846568	1.0000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.29802521	1.00000	.29802521	1.00000	.29802521	1.00000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.11908198	1.00000	.11908198	1.00000	.11908198	1.00000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.04966137	1.00000	.04966137	1.00000	.04966137	1.00000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
2.12229366	1.00000	2.12229366	1.00000	2.12229366	1.00000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
.29802521	1.00000	.29802521	1.00000	.29802521	1.00000
f 1 1.0		f 1 1.0		f 1 1.0	
0.77846568	1.00000	.29802521	1.00000	2.12229366	1.00000

Átomo de Carbono s1		Átomo de Carbono s2		Átomo de Carbono s3	
C 0		C 0		C 0	
S 8 1.00		S 8 1.00		S 8 1.00	
.4277367E+05	.6339796E-04	.4277367E+05	.6339796E-04	.4277367E+05	.6339796E-04
.7054809E+04	.4799749E-03	.7054809E+04	.4799749E-03	.7054809E+04	.4799749E-03
.1508823E+04	.2749696E-02	.1508823E+04	.2749696E-02	.1508823E+04	.2749696E-02
.4184427E+03	.1140956E-01	.4184427E+03	.1140956E-01	.4184427E+03	.1140956E-01
.1351118E+03	.3988582E-01	.1351118E+03	.3988582E-01	.1351118E+03	.3988582E-01
.4782079E+02	.1154555E+00	.4782079E+02	.1154555E+00	.4782079E+02	.1154555E+00
.1790121E+02	.2495145E+00	.1790121E+02	.2495145E+00	.1790121E+02	.2495145E+00
.7087460E+01	.2760255E+00	.7087460E+01	.2760255E+00	.7087460E+01	.2760255E+00
S 5 1.00		S 5 1.00		S 5 1.00	
.1351118E+03	.1073315E-03	.1351118E+03	.1073315E-03	.1351118E+03	.1073315E-03
.4782079E+02	.1446915E-02	.4782079E+02	.1446915E-02	.4782079E+02	.1446915E-02
.1790121E+02	.9179265E-02	.1790121E+02	.9179265E-02	.1790121E+02	.9179265E-02
.7087460E+01	.4269328E-01	.7087460E+01	.4269328E-01	.7087460E+01	.4269328E-01
.2967845E+01	.8550392E-01	.2967845E+01	.8550392E-01	.2967845E+01	.8550392E-01
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
1.16355749	1.0000000	1.16355749	1.0000000	1.16355749	1.0000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.58297240	1.00000	0.58297240	1.00000	0.58297240	1.00000
S 1 1.00		S 1 1.00		S 1 1.00	
0.26549972	1.000000	0.26549972	1.000000	0.26549972	1.000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.10990972	1.00000	0.10990972	1.00000	0.10990972	1.00000
P 4 1.00		P 4 1.00		P 4 1.00	
88.16708612	9.017E-4	88.16708612	9.017E-4	88.16708612	9.017E-4
29.28954878	0.00429343	29.28954878	0.00429343	29.28954878	0.00429343
10.07286019	0.02092206	10.07286019	0.02092206	10.07286019	0.02092206
3.58613688	0.07895054	3.58613688	0.07895054	3.58613688	0.07895054
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
1.32170596	1.00000	1.32170596	1.00000	1.32170596	1.00000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.50428583	1.00000	.50428583	1.00000	.50428583	1.00000
P 1 1.00		P 1 1.00		P 1 1.00	
.19918316	1.00000	.19918316	1.00000	.19918316	1.00000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.08144462	1.00000	.08144462	1.00000	.08144462	1.00000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
1.16355749	1.00000	1.16355749	1.00000	1.16355749	1.00000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
0.58297240	1.00000	0.58297240	1.00000	0.58297240	1.00000
F 1 1.0		F 1 1.0		f 1 1.0	
0.26549972	1.00000	0.58297240	1.00000	1.16355749	1.00000

Átomo de Carbono s4	Átomo de Carbono s5	Átomo de Carbono s6
C 0	C 0	C 0
S 8 1.00	S 8 1.00	S 8 1.00
.4277367E+05 .6339796E-04	.4277367E+05 .6339796E-04	.4277367E+05 .6339796E-04
.7054809E+04 .4799749E-03	.7054809E+04 .4799749E-03	.7054809E+04 .4799749E-03
.1508823E+04 .2749696E-02	.1508823E+04 .2749696E-02	.1508823E+04 .2749696E-02
.4184427E+03 .1140956E-01	.4184427E+03 .1140956E-01	.4184427E+03 .1140956E-01
.1351118E+03 .3988582E-01	.1351118E+03 .3988582E-01	.1351118E+03 .3988582E-01
.4782079E+02 .1154555E+00	.4782079E+02 .1154555E+00	.4782079E+02 .1154555E+00
.1790121E+02 .2495145E+00	.1790121E+02 .2495145E+00	.1790121E+02 .2495145E+00
.7087460E+01 .2760255E+00	.7087460E+01 .2760255E+00	.7087460E+01 .2760255E+00
S 5 1.00	S 5 1.00	S 5 1.00
.1351118E+03 .1073315E-03	.1351118E+03 .1073315E-03	.1351118E+03 .1073315E-03
.4782079E+02 .1446915E-02	.4782079E+02 .1446915E-02	.4782079E+02 .1446915E-02
.1790121E+02 .9179265E-02	.1790121E+02 .9179265E-02	.1790121E+02 .9179265E-02
.7087460E+01 .4269328E-01	.7087460E+01 .4269328E-01	.7087460E+01 .4269328E-01
.2967845E+01 .8550392E-01	.2967845E+01 .8550392E-01	.2967845E+01 .8550392E-01
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
1.16355749 1.0000000	1.16355749 1.0000000	1.16355749 1.0000000
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
0.58297240 1.00000	0.58297240 1.00000	0.58297240 1.00000
S 1 1.00	S 1 1.00	S 1 1.00
0.26549972 1.000000	0.26549972 1.000000	0.26549972 1.000000
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
0.10990972 1.00000	0.10990972 1.00000	0.10990972 1.00000
P 4 1.00	P 4 1.00	P 4 1.00
88.16708612 9.017E-4	88.16708612 9.017E-4	88.16708612 9.017E-4
29.28954878 0.00429343	29.28954878 0.00429343	29.28954878 0.00429343
10.07286019 0.02092206	10.07286019 0.02092206	10.07286019 0.02092206
3.58613688 0.07895054	3.58613688 0.07895054	3.58613688 0.07895054
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
1.32170596 1.00000	1.32170596 1.00000	1.32170596 1.00000
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
.50428583 1.00000	.50428583 1.00000	.50428583 1.00000
P 1 1.00	P 1 1.00	P 1 1.00
.19918316 1.00000	.19918316 1.00000	.19918316 1.00000
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
.08144462 1.00000	.08144462 1.00000	.08144462 1.00000
d 1 1.0	d 1 1.0	d 1 1.0
2.967845 1.00000	2.967845 1.00000	2.967845 1.00000
d 1 1.0	d 1 1.0	d 1 1.0
1.16355749 1.00000	1.16355749 1.00000	1.16355749 1.00000
f 1 1.0	f 1 1.0	f 1 1.0
0.58297240 1.00000	1.16355749 1.00000	2.967845 1.00000

Átomo de Carbono p1		Átomo de Carbono p2		Átomo de Carbono p3	
C 0		C 0		C 0	
S 8 1.00		S 8 1.00		S 8 1.00	
.4277367E+05	.6339796E-04	.4277367E+05	.6339796E-04	.4277367E+05	.6339796E-04
.7054809E+04	.4799749E-03	.7054809E+04	.4799749E-03	.7054809E+04	.4799749E-03
.1508823E+04	.2749696E-02	.1508823E+04	.2749696E-02	.1508823E+04	.2749696E-02
.4184427E+03	.1140956E-01	.4184427E+03	.1140956E-01	.4184427E+03	.1140956E-01
.1351118E+03	.3988582E-01	.1351118E+03	.3988582E-01	.1351118E+03	.3988582E-01
.4782079E+02	.1154555E+00	.4782079E+02	.1154555E+00	.4782079E+02	.1154555E+00
.1790121E+02	.2495145E+00	.1790121E+02	.2495145E+00	.1790121E+02	.2495145E+00
.7087460E+01	.2760255E+00	.7087460E+01	.2760255E+00	.7087460E+01	.2760255E+00
S 5 1.00		S 5 1.00		S 5 1.00	
.1351118E+03	.1073315E-03	.1351118E+03	.1073315E-03	.1351118E+03	.1073315E-03
.4782079E+02	.1446915E-02	.4782079E+02	.1446915E-02	.4782079E+02	.1446915E-02
.1790121E+02	.9179265E-02	.1790121E+02	.9179265E-02	.1790121E+02	.9179265E-02
.7087460E+01	.4269328E-01	.7087460E+01	.4269328E-01	.7087460E+01	.4269328E-01
.2967845E+01	.8550392E-01	.2967845E+01	.8550392E-01	.2967845E+01	.8550392E-01
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
1.16355749	1.0000000	1.16355749	1.0000000	1.16355749	1.0000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.58297240	1.00000	0.58297240	1.00000	0.58297240	1.00000
S 1 1.00		S 1 1.00		S 1 1.00	
0.26549972	1.000000	0.26549972	1.000000	0.26549972	1.000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.10990972	1.00000	0.10990972	1.00000	0.10990972	1.00000
P 4 1.00		P 4 1.00		P 4 1.00	
88.16708612	9.017E-4	88.16708612	9.017E-4	88.16708612	9.017E-4
29.28954878	0.00429343	29.28954878	0.00429343	29.28954878	0.00429343
10.07286019	0.02092206	10.07286019	0.02092206	10.07286019	0.02092206
3.58613688	0.07895054	3.58613688	0.07895054	3.58613688	0.07895054
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
1.32170596	1.00000	1.32170596	1.00000	1.32170596	1.00000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.50428583	1.00000	.50428583	1.00000	.50428583	1.00000
P 1 1.00		P 1 1.00		P 1 1.00	
.19918316	1.00000	.19918316	1.00000	.19918316	1.00000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.08144462	1.00000	.08144462	1.00000	.08144462	1.00000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
1.3	1.00000	1.3	1.00000	1.3	1.00000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
.5	1.00000	.5	1.00000	.5	1.00000
F 1 1.0		F 1 1.0		F 1 1.0	
.2	1.00000	.5	1.00000	1.3	1.00000

Átomo de Carbono p4		Átomo de Carbono p5		Átomo de Carbono p6	
C 0		C 0		C 0	
S 8 1.00		S 8 1.00		S 8 1.00	
.4277367E+05	.6339796E-04	.4277367E+05	.6339796E-04	.4277367E+05	.6339796E-04
.7054809E+04	.4799749E-03	.7054809E+04	.4799749E-03	.7054809E+04	.4799749E-03
.1508823E+04	.2749696E-02	.1508823E+04	.2749696E-02	.1508823E+04	.2749696E-02
.4184427E+03	.1140956E-01	.4184427E+03	.1140956E-01	.4184427E+03	.1140956E-01
.1351118E+03	.3988582E-01	.1351118E+03	.3988582E-01	.1351118E+03	.3988582E-01
.4782079E+02	.1154555E+00	.4782079E+02	.1154555E+00	.4782079E+02	.1154555E+00
.1790121E+02	.2495145E+00	.1790121E+02	.2495145E+00	.1790121E+02	.2495145E+00
.7087460E+01	.2760255E+00	.7087460E+01	.2760255E+00	.7087460E+01	.2760255E+00
S 5 1.00		S 5 1.00		S 5 1.00	
.1351118E+03	.1073315E-03	.1351118E+03	.1073315E-03	.1351118E+03	.1073315E-03
.4782079E+02	.1446915E-02	.4782079E+02	.1446915E-02	.4782079E+02	.1446915E-02
.1790121E+02	.9179265E-02	.1790121E+02	.9179265E-02	.1790121E+02	.9179265E-02
.7087460E+01	.4269328E-01	.7087460E+01	.4269328E-01	.7087460E+01	.4269328E-01
.2967845E+01	.8550392E-01	.2967845E+01	.8550392E-01	.2967845E+01	.8550392E-01
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
1.16355749	1.0000000	1.16355749	1.0000000	1.16355749	1.0000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.58297240	1.00000	0.58297240	1.00000	0.58297240	1.00000
S 1 1.00		S 1 1.00		S 1 1.00	
0.26549972	1.000000	0.26549972	1.000000	0.26549972	1.000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.10990972	1.00000	0.10990972	1.00000	0.10990972	1.00000
P 4 1.00		P 4 1.00		P 4 1.00	
88.16708612	9.017E-4	88.16708612	9.017E-4	88.16708612	9.017E-4
29.28954878	0.00429343	29.28954878	0.00429343	29.28954878	0.00429343
10.07286019	0.02092206	10.07286019	0.02092206	10.07286019	0.02092206
3.58613688	0.07895054	3.58613688	0.07895054	3.58613688	0.07895054
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
1.32170596	1.00000	1.32170596	1.00000	1.32170596	1.00000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.50428583	1.00000	.50428583	1.00000	.50428583	1.00000
P 1 1.00		P 1 1.00		P 1 1.00	
.19918316	1.00000	.19918316	1.00000	.19918316	1.00000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.08144462	1.00000	.08144462	1.00000	.08144462	1.00000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
3.58613688	1.00000	3.58613688	1.00000	3.58613688	1.00000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
.50428583	1.00000	.50428583	1.00000	.50428583	1.00000
F 1 1.0		F 1 1.0		F 1 1.0	
1.32170596	1.00000	1.32170596	1.00000	.50428583	1.00000

Átomo de Nitrogênio s1	Átomo de Nitrogênio s2	Átomo de Nitrogênio s3
N 0	N 0	N 0
s 8 1.0	s 8 1.0	s 8 1.0
.6859730E+05 .5172736E-04	.6859730E+05 .5172736E-04	.6859730E+05 .5172736E-04
.1144297E+05 .3852528E-03	.1144297E+05 .3852528E-03	.1144297E+05 .3852528E-03
.2457001E+04 .2216373E-02	.2457001E+04 .2216373E-02	.2457001E+04 .2216373E-02
.6790570E+03 .9221870E-02	.6790570E+03 .9221870E-02	.6790570E+03 .9221870E-02
.2221687E+03 .3139730E-01	.2221687E+03 .3139730E-01	.2221687E+03 .3139730E-01
.8001633E+02 .9149207E-01	.8001633E+02 .9149207E-01	.8001633E+02 .9149207E-01
.3088252E+02 .1950537E+00	.3088252E+02 .1950537E+00	.3088252E+02 .1950537E+00
.1277277E+02 .2512571E+00	.1277277E+02 .2512571E+00	.1277277E+02 .2512571E+00
s 5 1.0	s 5 1.0	s 5 1.0
.2221687E+03 .1274657E-03	.2221687E+03 .1274657E-03	.2221687E+03 .1274657E-03
.8001633E+02 .9647322E-03	.8001633E+02 .9647322E-03	.8001633E+02 .9647322E-03
.3088252E+02 .6853421E-02	.3088252E+02 .6853421E-02	.3088252E+02 .6853421E-02
.1277277E+02 .2811075E-01	.1277277E+02 .2811075E-01	.1277277E+02 .2811075E-01
.5481483E+01 .8243486E-01	.5481483E+01 .8243486E-01	.5481483E+01 .8243486E-01
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
2.29130198 1.0000	2.29130198 1.0000	2.29130198 1.0000
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
0.93782168 1.00000	0.93782168 1.00000	0.93782168 1.00000
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
0.37584771 1.000000	0.37584771 1.000000	0.37584771 1.000000
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
0.14748819 1.00000	0.14748819 1.00000	0.14748819 1.00000
p 4 1.0	p 4 1.0	p 4 1.0
115.55546874 .00108145	115.55546874 .00108145	115.55546874 .00108145
36.94101445 .00560505	36.94101445 .00560505	36.94101445 .00560505
12.37347622 .02789136	12.37347622 .02789136	12.37347622 .02789136
4.34249408 .10482340	4.34249408 .10482340	4.34249408 .10482340
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
1.59680300 1.00000	1.59680300 1.00000	1.59680300 1.00000
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
.61521659 1.00000	.61521659 1.00000	.61521659 1.00000
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
.24835296 1.00000	.24835296 1.00000	.24835296 1.00000
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
.10504496 1.00000	.10504496 1.00000	.10504496 1.00000
d 1 1.0	d 1 1.0	d 1 1.0
2.29130198 1.00000	2.29130198 1.00000	2.29130198 1.00000
d 1 1.0	d 1 1.0	d 1 1.0
0.93782168 1.00000	0.93782168 1.00000	0.93782168 1.00000
f 1 1.0	f 1 1.0	f 1 1.0
0.37584771 1.00000	0.93782168 1.00000	2.29130198 1.00000

Átomo de Nitrogênio s4	Átomo de Nitrogênio s5	Átomo de Nitrogênio s6
N 0	N 0	N 0
s 8 1.0	s 8 1.0	s 8 1.0
.6859730E+05 .5172736E-04	.6859730E+05 .5172736E-04	.6859730E+05 .5172736E-04
.1144297E+05 .3852528E-03	.1144297E+05 .3852528E-03	.1144297E+05 .3852528E-03
.2457001E+04 .2216373E-02	.2457001E+04 .2216373E-02	.2457001E+04 .2216373E-02
.6790570E+03 .9221870E-02	.6790570E+03 .9221870E-02	.6790570E+03 .9221870E-02
.2221687E+03 .3139730E-01	.2221687E+03 .3139730E-01	.2221687E+03 .3139730E-01
.8001633E+02 .9149207E-01	.8001633E+02 .9149207E-01	.8001633E+02 .9149207E-01
.3088252E+02 .1950537E+00	.3088252E+02 .1950537E+00	.3088252E+02 .1950537E+00
.1277277E+02 .2512571E+00	.1277277E+02 .2512571E+00	.1277277E+02 .2512571E+00
s 5 1.0	s 5 1.0	s 5 1.0
.2221687E+03 .1274657E-03	.2221687E+03 .1274657E-03	.2221687E+03 .1274657E-03
.8001633E+02 .9647322E-03	.8001633E+02 .9647322E-03	.8001633E+02 .9647322E-03
.3088252E+02 .6853421E-02	.3088252E+02 .6853421E-02	.3088252E+02 .6853421E-02
.1277277E+02 .2811075E-01	.1277277E+02 .2811075E-01	.1277277E+02 .2811075E-01
.5481483E+01 .8243486E-01	.5481483E+01 .8243486E-01	.5481483E+01 .8243486E-01
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
2.29130198 1.0000	2.29130198 1.0000	2.29130198 1.0000
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
0.93782168 1.00000	0.93782168 1.00000	0.93782168 1.00000
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
0.37584771 1.000000	0.37584771 1.000000	0.37584771 1.000000
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
0.14748819 1.00000	0.14748819 1.00000	0.14748819 1.00000
p 4 1.0	p 4 1.0	p 4 1.0
115.55546874 .00108145	115.55546874 .00108145	115.55546874 .00108145
36.94101445 .00560505	36.94101445 .00560505	36.94101445 .00560505
12.37347622 .02789136	12.37347622 .02789136	12.37347622 .02789136
4.34249408 .10482340	4.34249408 .10482340	4.34249408 .10482340
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
1.59680300 1.00000	1.59680300 1.00000	1.59680300 1.00000
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
.61521659 1.00000	.61521659 1.00000	.61521659 1.00000
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
.24835296 1.00000	.24835296 1.00000	.24835296 1.00000
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
.10504496 1.00000	.10504496 1.00000	.10504496 1.00000
d 1 1.0	d 1 1.0	d 1 1.0
5.481483 1.00000	5.481483 1.00000	5.481483 1.00000
d 1 1.0	d 1 1.0	d 1 1.0
2.29130198 1.00000	2.29130198 1.00000	2.29130198 1.00000
f 1 1.0	f 1 1.0	f 1 1.0
0.93782168 1.00000	2.29130198 1.00000	5.481483 1.00000

Átomo de Nitrogênio p1		Átomo de Nitrogênio p2		Átomo de Nitrogênio p3	
N 0		N 0		N 0	
s 8 1.0		s 8 1.0		s 8 1.0	
.6859730E+05	.5172736E-04	.6859730E+05	.5172736E-04	.6859730E+05	.5172736E-04
.1144297E+05	.3852528E-03	.1144297E+05	.3852528E-03	.1144297E+05	.3852528E-03
.2457001E+04	.2216373E-02	.2457001E+04	.2216373E-02	.2457001E+04	.2216373E-02
.6790570E+03	.9221870E-02	.6790570E+03	.9221870E-02	.6790570E+03	.9221870E-02
.2221687E+03	.3139730E-01	.2221687E+03	.3139730E-01	.2221687E+03	.3139730E-01
.8001633E+02	.9149207E-01	.8001633E+02	.9149207E-01	.8001633E+02	.9149207E-01
.3088252E+02	.1950537E+00	.3088252E+02	.1950537E+00	.3088252E+02	.1950537E+00
.1277277E+02	.2512571E+00	.1277277E+02	.2512571E+00	.1277277E+02	.2512571E+00
s 5 1.0		s 5 1.0		s 5 1.0	
.2221687E+03	.1274657E-03	.2221687E+03	.1274657E-03	.2221687E+03	.1274657E-03
.8001633E+02	.9647322E-03	.8001633E+02	.9647322E-03	.8001633E+02	.9647322E-03
.3088252E+02	.6853421E-02	.3088252E+02	.6853421E-02	.3088252E+02	.6853421E-02
.1277277E+02	.2811075E-01	.1277277E+02	.2811075E-01	.1277277E+02	.2811075E-01
.5481483E+01	.8243486E-01	.5481483E+01	.8243486E-01	.5481483E+01	.8243486E-01
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
2.29130198	1.0000	2.29130198	1.0000	2.29130198	1.0000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.93782168	1.00000	0.93782168	1.00000	0.93782168	1.00000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.37584771	1.000000	0.37584771	1.000000	0.37584771	1.000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.14748819	1.00000	0.14748819	1.00000	0.14748819	1.00000
p 4 1.0		p 4 1.0		p 4 1.0	
115.55546874	.00108145	115.55546874	.00108145	115.55546874	.00108145
36.94101445	.00560505	36.94101445	.00560505	36.94101445	.00560505
12.37347622	.02789136	12.37347622	.02789136	12.37347622	.02789136
4.34249408	.10482340	4.34249408	.10482340	4.34249408	.10482340
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
1.59680300	1.00000	1.59680300	1.00000	1.59680300	1.00000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.61521659	1.00000	.61521659	1.00000	.61521659	1.00000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.24835296	1.00000	.24835296	1.00000	.24835296	1.00000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.10504496	1.00000	.10504496	1.00000	.10504496	1.00000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
1.6	1.00000	1.6	1.00000	1.6	1.00000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
.62	1.00000	.62	1.00000	.62	1.00000
f 1 1.0		f 1 1.0		f 1 1.0	
0.25	1.00000	0.62	1.00000	1.6	1.00000

Átomo de Nitrogênio p4		Átomo de Nitrogênio p5		Átomo de Nitrogênio p6	
N 0		N 0		N 0	
s 8 1.0		s 8 1.0		s 8 1.0	
.6859730E+05	.5172736E-04	.6859730E+05	.5172736E-04	.6859730E+05	.5172736E-04
.1144297E+05	.3852528E-03	.1144297E+05	.3852528E-03	.1144297E+05	.3852528E-03
.2457001E+04	.2216373E-02	.2457001E+04	.2216373E-02	.2457001E+04	.2216373E-02
.6790570E+03	.9221870E-02	.6790570E+03	.9221870E-02	.6790570E+03	.9221870E-02
.2221687E+03	.3139730E-01	.2221687E+03	.3139730E-01	.2221687E+03	.3139730E-01
.8001633E+02	.9149207E-01	.8001633E+02	.9149207E-01	.8001633E+02	.9149207E-01
.3088252E+02	.1950537E+00	.3088252E+02	.1950537E+00	.3088252E+02	.1950537E+00
.1277277E+02	.2512571E+00	.1277277E+02	.2512571E+00	.1277277E+02	.2512571E+00
s 5 1.0		s 5 1.0		s 5 1.0	
.2221687E+03	.1274657E-03	.2221687E+03	.1274657E-03	.2221687E+03	.1274657E-03
.8001633E+02	.9647322E-03	.8001633E+02	.9647322E-03	.8001633E+02	.9647322E-03
.3088252E+02	.6853421E-02	.3088252E+02	.6853421E-02	.3088252E+02	.6853421E-02
.1277277E+02	.2811075E-01	.1277277E+02	.2811075E-01	.1277277E+02	.2811075E-01
.5481483E+01	.8243486E-01	.5481483E+01	.8243486E-01	.5481483E+01	.8243486E-01
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
2.29130198	1.0000	2.29130198	1.0000	2.29130198	1.0000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.93782168	1.00000	0.93782168	1.00000	0.93782168	1.00000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.37584771	1.000000	0.37584771	1.000000	0.37584771	1.000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.14748819	1.00000	0.14748819	1.00000	0.14748819	1.00000
p 4 1.0		p 4 1.0		p 4 1.0	
115.55546874	.00108145	115.55546874	.00108145	115.55546874	.00108145
36.94101445	.00560505	36.94101445	.00560505	36.94101445	.00560505
12.37347622	.02789136	12.37347622	.02789136	12.37347622	.02789136
4.34249408	.10482340	4.34249408	.10482340	4.34249408	.10482340
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
1.59680300	1.00000	1.59680300	1.00000	1.59680300	1.00000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.61521659	1.00000	.61521659	1.00000	.61521659	1.00000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.24835296	1.00000	.24835296	1.00000	.24835296	1.00000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.10504496	1.00000	.10504496	1.00000	.10504496	1.00000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
4.34249408	1.00000	4.34249408	1.00000	4.34249408	1.00000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
.61521659	1.00000	.61521659	1.00000	.61521659	1.00000
f 1 1.0		f 1 1.0		f 1 1.0	
1.5968030	1.00000	4.34249408	1.00000	.61521659	1.00000

Átomo de Oxigênio s1		Átomo de Oxigênio s2		Átomo de Oxigênio s3	
O 0		O 0		O 0	
s 8 1.0		s 8 1.0		s 8 1.0	
.6850184E+05	.7206133E-04	.6850184E+05	.7206133E-04	.6850184E+05	.7206133E-04
.1194538E+05	.4969131E-03	.1194538E+05	.4969131E-03	.1194538E+05	.4969131E-03
.2631352E+04	.2878288E-02	.2631352E+04	.2878288E-02	.2631352E+04	.2878288E-02
.7068710E+03	.1266227E-01	.7068710E+03	.1266227E-01	.7068710E+03	.1266227E-01
.2235548E+03	.4403076E-01	.2235548E+03	.4403076E-01	.2235548E+03	.4403076E-01
.8035470E+02	.1192782E+00	.8035470E+02	.1192782E+00	.8035470E+02	.1192782E+00
.3169001E+02	.2342465E+00	.3169001E+02	.2342465E+00	.3169001E+02	.2342465E+00
.1323787E+02	.2562697E+00	.1323787E+02	.2562697E+00	.1323787E+02	.2562697E+00
s 5 1.0		s 5 1.0		s 5 1.0	
.2235548E+03	-.1735174E-03	.2235548E+03	-.1735174E-03	.2235548E+03	-.1735174E-03
.8035470E+02	-.1818311E-02	.8035470E+02	-.1818311E-02	.8035470E+02	-.1818311E-02
.3169001E+02	-.1056895E-01	.3169001E+02	-.1056895E-01	.3169001E+02	-.1056895E-01
.1323787E+02	-.4405121E-01	.1323787E+02	-.4405121E-01	.1323787E+02	-.4405121E-01
.5654559E+01	-.8776029E-01	.5654559E+01	-.8776029E-01	.5654559E+01	-.8776029E-01
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
2.38432337	1.00000	2.38432337	1.00000	2.38432337	1.00000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.95811564	1.000000	0.95811564	1.000000	0.95811564	1.000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.35420739	1.0000000	0.35420739	1.0000000	0.35420739	1.0000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.11630137	1.0000000	0.11630137	1.0000000	0.11630137	1.0000000
p 4 1.0		p 4 1.0		p 4 1.0	
185.52355500	9.5072E-4	185.52355500	9.5072E-4	185.52355500	9.5072E-4
45.86124925	0.00753132	45.86124925	0.00753132	45.86124925	0.00753132
14.16232486	0.03689666	14.16232486	0.03689666	14.16232486	0.03689666
5.13966757	0.11836468	5.13966757	0.11836468	5.13966757	0.11836468
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
2.06213585	1.00000	2.06213585	1.00000	2.06213585	1.00000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.86050071	1.000000	.86050071	1.000000	.86050071	1.000000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.35132324	1.000000	.35132324	1.000000	.35132324	1.000000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.13202439	1.00000	.13202439	1.00000	.13202439	1.00000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
2.38432337	1.00000	2.38432337	1.00000	2.38432337	1.00000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
0.95811564	1.000000	0.95811564	1.000000	0.95811564	1.000000
f 1 1.0		f 1 1.0		f 1 1.0	
0.35420739	1.00000	0.95811564	1.00000	2.38432337	1.00000

Átomo de Oxigênio s4		Átomo de Oxigênio s5		Átomo de Oxigênio s6	
O 0		O 0		O 0	
s 8 1.0		s 8 1.0		s 8 1.0	
.6850184E+05	.7206133E-04	.6850184E+05	.7206133E-04	.6850184E+05	.7206133E-04
.1194538E+05	.4969131E-03	.1194538E+05	.4969131E-03	.1194538E+05	.4969131E-03
.2631352E+04	.2878288E-02	.2631352E+04	.2878288E-02	.2631352E+04	.2878288E-02
.7068710E+03	.1266227E-01	.7068710E+03	.1266227E-01	.7068710E+03	.1266227E-01
.2235548E+03	.4403076E-01	.2235548E+03	.4403076E-01	.2235548E+03	.4403076E-01
.8035470E+02	.1192782E+00	.8035470E+02	.1192782E+00	.8035470E+02	.1192782E+00
.3169001E+02	.2342465E+00	.3169001E+02	.2342465E+00	.3169001E+02	.2342465E+00
.1323787E+02	.2562697E+00	.1323787E+02	.2562697E+00	.1323787E+02	.2562697E+00
s 5 1.0		s 5 1.0		s 5 1.0	
.2235548E+03	-.1735174E-03	.2235548E+03	-.1735174E-03	.2235548E+03	-.1735174E-03
.8035470E+02	-.1818311E-02	.8035470E+02	-.1818311E-02	.8035470E+02	-.1818311E-02
.3169001E+02	-.1056895E-01	.3169001E+02	-.1056895E-01	.3169001E+02	-.1056895E-01
.1323787E+02	-.4405121E-01	.1323787E+02	-.4405121E-01	.1323787E+02	-.4405121E-01
.5654559E+01	-.8776029E-01	.5654559E+01	-.8776029E-01	.5654559E+01	-.8776029E-01
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
2.38432337	1.00000	2.38432337	1.00000	2.38432337	1.00000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.95811564	1.000000	0.95811564	1.000000	0.95811564	1.000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.35420739	1.0000000	0.35420739	1.0000000	0.35420739	1.0000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.11630137	1.0000000	0.11630137	1.0000000	0.11630137	1.0000000
p 4 1.0		p 4 1.0		p 4 1.0	
185.52355500	9.5072E-4	185.52355500	9.5072E-4	185.52355500	9.5072E-4
45.86124925	0.00753132	45.86124925	0.00753132	45.86124925	0.00753132
14.16232486	0.03689666	14.16232486	0.03689666	14.16232486	0.03689666
5.13966757	0.11836468	5.13966757	0.11836468	5.13966757	0.11836468
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
2.06213585	1.00000	2.06213585	1.00000	2.06213585	1.00000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.86050071	1.000000	.86050071	1.000000	.86050071	1.000000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.35132324	1.000000	.35132324	1.000000	.35132324	1.000000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.13202439	1.00000	.13202439	1.00000	.13202439	1.00000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
5.654559	1.00000	5.654559	1.00000	5.654559	1.00000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
2.38432337	1.000000	2.38432337	1.000000	2.38432337	1.000000
f 1 1.0		f 1 1.0		f 1 1.0	
0.95811564	1.00000	2.38432337	1.00000	5.654559	1.00000

Átomo de Oxigênio p1		Átomo de Oxigênio p2		Átomo de Oxigênio p3	
O 0		O 0		O 0	
s 8 1.0		s 8 1.0		s 8 1.0	
.6850184E+05	.7206133E-04	.6850184E+05	.7206133E-04	.6850184E+05	.7206133E-04
.1194538E+05	.4969131E-03	.1194538E+05	.4969131E-03	.1194538E+05	.4969131E-03
.2631352E+04	.2878288E-02	.2631352E+04	.2878288E-02	.2631352E+04	.2878288E-02
.7068710E+03	.1266227E-01	.7068710E+03	.1266227E-01	.7068710E+03	.1266227E-01
.2235548E+03	.4403076E-01	.2235548E+03	.4403076E-01	.2235548E+03	.4403076E-01
.8035470E+02	.1192782E+00	.8035470E+02	.1192782E+00	.8035470E+02	.1192782E+00
.3169001E+02	.2342465E+00	.3169001E+02	.2342465E+00	.3169001E+02	.2342465E+00
.1323787E+02	.2562697E+00	.1323787E+02	.2562697E+00	.1323787E+02	.2562697E+00
s 5 1.0		s 5 1.0		s 5 1.0	
.2235548E+03	-.1735174E-03	.2235548E+03	-.1735174E-03	.2235548E+03	-.1735174E-03
.8035470E+02	-.1818311E-02	.8035470E+02	-.1818311E-02	.8035470E+02	-.1818311E-02
.3169001E+02	-.1056895E-01	.3169001E+02	-.1056895E-01	.3169001E+02	-.1056895E-01
.1323787E+02	-.4405121E-01	.1323787E+02	-.4405121E-01	.1323787E+02	-.4405121E-01
.5654559E+01	-.8776029E-01	.5654559E+01	-.8776029E-01	.5654559E+01	-.8776029E-01
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
2.38432337	1.000000	2.38432337	1.000000	2.38432337	1.000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.95811564	1.000000	0.95811564	1.000000	0.95811564	1.000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.35420739	1.0000000	0.35420739	1.0000000	0.35420739	1.0000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.11630137	1.0000000	0.11630137	1.0000000	0.11630137	1.0000000
p 4 1.0		p 4 1.0		p 4 1.0	
185.52355500	9.5072E-4	185.52355500	9.5072E-4	185.52355500	9.5072E-4
45.86124925	0.00753132	45.86124925	0.00753132	45.86124925	0.00753132
14.16232486	0.03689666	14.16232486	0.03689666	14.16232486	0.03689666
5.13966757	0.11836468	5.13966757	0.11836468	5.13966757	0.11836468
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
2.06213585	1.000000	2.06213585	1.000000	2.06213585	1.000000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.86050071	1.000000	.86050071	1.000000	.86050071	1.000000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.35132324	1.000000	.35132324	1.000000	.35132324	1.000000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.13202439	1.000000	.13202439	1.000000	.13202439	1.000000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
2.06213585	1.000000	2.06213585	1.000000	2.06213585	1.000000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
.86050071	1.000000	.86050071	1.000000	.86050071	1.000000
f 1 1.0		f 1 1.0		f 1 1.0	
.35132324	1.000000	.86050071	1.000000	2.06213585	1.000000

Átomo de Oxigênio p4		Átomo de Oxigênio p5		Átomo de Oxigênio p6	
O 0		O 0		O 0	
s 8 1.0		s 8 1.0		s 8 1.0	
.6850184E+05	.7206133E-04	.6850184E+05	.7206133E-04	.6850184E+05	.7206133E-04
.1194538E+05	.4969131E-03	.1194538E+05	.4969131E-03	.1194538E+05	.4969131E-03
.2631352E+04	.2878288E-02	.2631352E+04	.2878288E-02	.2631352E+04	.2878288E-02
.7068710E+03	.1266227E-01	.7068710E+03	.1266227E-01	.7068710E+03	.1266227E-01
.2235548E+03	.4403076E-01	.2235548E+03	.4403076E-01	.2235548E+03	.4403076E-01
.8035470E+02	.1192782E+00	.8035470E+02	.1192782E+00	.8035470E+02	.1192782E+00
.3169001E+02	.2342465E+00	.3169001E+02	.2342465E+00	.3169001E+02	.2342465E+00
.1323787E+02	.2562697E+00	.1323787E+02	.2562697E+00	.1323787E+02	.2562697E+00
s 5 1.0		s 5 1.0		s 5 1.0	
.2235548E+03	-.1735174E-03	.2235548E+03	-.1735174E-03	.2235548E+03	-.1735174E-03
.8035470E+02	-.1818311E-02	.8035470E+02	-.1818311E-02	.8035470E+02	-.1818311E-02
.3169001E+02	-.1056895E-01	.3169001E+02	-.1056895E-01	.3169001E+02	-.1056895E-01
.1323787E+02	-.4405121E-01	.1323787E+02	-.4405121E-01	.1323787E+02	-.4405121E-01
.5654559E+01	-.8776029E-01	.5654559E+01	-.8776029E-01	.5654559E+01	-.8776029E-01
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
2.38432337	1.000000	2.38432337	1.000000	2.38432337	1.000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.95811564	1.000000	0.95811564	1.000000	0.95811564	1.000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.35420739	1.0000000	0.35420739	1.0000000	0.35420739	1.0000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.11630137	1.0000000	0.11630137	1.0000000	0.11630137	1.0000000
p 4 1.0		p 4 1.0		p 4 1.0	
185.52355500	9.5072E-4	185.52355500	9.5072E-4	185.52355500	9.5072E-4
45.86124925	0.00753132	45.86124925	0.00753132	45.86124925	0.00753132
14.16232486	0.03689666	14.16232486	0.03689666	14.16232486	0.03689666
5.13966757	0.11836468	5.13966757	0.11836468	5.13966757	0.11836468
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
2.06213585	1.000000	2.06213585	1.000000	2.06213585	1.000000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.86050071	1.000000	.86050071	1.000000	.86050071	1.000000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.35132324	1.000000	.35132324	1.000000	.35132324	1.000000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.13202439	1.000000	.13202439	1.000000	.13202439	1.000000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
5.13966757	1.000000	5.13966757	1.000000	5.13966757	1.000000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
.86050071	1.000000	.86050071	1.000000	.86050071	1.000000
f 1 1.0		f 1 1.0		f 1 1.0	
2.06213585	1.000000	5.13966757	1.000000	.86050071	1.000000

Átomo de Flúor s1	Átomo de Flúor s2	Átomo de Flúor s3
F 0	F 0	F 0
s 8 1.0	s 8 1.0	s 8 1.0
.1253180E+06 .4639304E-04	.1253180E+06 .4639304E-04	.1253180E+06 .4639304E-04
.2060601E+05 .3518620E-03	.2060601E+05 .3518620E-03	.2060601E+05 .3518620E-03
.4429130E+04 .1991471E-02	.4429130E+04 .1991471E-02	.4429130E+04 .1991471E-02
.1244477E+04 .8106540E-02	.1244477E+04 .8106540E-02	.1244477E+04 .8106540E-02
.4101958E+03 .2777441E-01	.4101958E+03 .2777441E-01	.4101958E+03 .2777441E-01
.1476485E+03 .8237795E-01	.1476485E+03 .8237795E-01	.1476485E+03 .8237795E-01
.5651170E+02 .1838542E+00	.5651170E+02 .1838542E+00	.5651170E+02 .1838542E+00
.2299955E+02 .2437778E+00	.2299955E+02 .2437778E+00	.2299955E+02 .2437778E+00
s 5 1.0	s 5 1.0	s 5 1.0
.4101958E+03 -.1041103E-03	.4101958E+03 -.1041103E-03	.4101958E+03 -.1041103E-03
.1476485E+03 -.8781763E-03	.1476485E+03 -.8781763E-03	.1476485E+03 -.8781763E-03
.5651170E+02 -.6465249E-02	.5651170E+02 -.6465249E-02	.5651170E+02 -.6465249E-02
.2299955E+02 -.2881137E-01	.2299955E+02 -.2881137E-01	.2299955E+02 -.2881137E-01
.9774116E+01 -.8271995E-01	.9774116E+01 -.8271995E-01	.9774116E+01 -.8271995E-01
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
4.12431288 1.000000	4.12431288 1.000000	4.12431288 1.000000
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
1.68042062 1.000000	1.68042062 1.000000	1.68042062 1.000000
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
0.66111449 1.000000	0.66111449 1.000000	0.66111449 1.000000
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
0.25114679 1.000000	0.25114679 1.000000	0.25114679 1.000000
p 4 1.0	p 4 1.0	p 4 1.0
182.02787318 0.00128395	182.02787318 0.00128395	182.02787318 0.00128395
60.85271201 0.00609615	60.85271201 0.00609615	60.85271201 0.00609615
20.95653229 0.03065703	20.95653229 0.03065703	20.95653229 0.03065703
7.43457836 0.11610178	7.43457836 0.11610178	7.43457836 0.11610178
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
2.71700667 1.000000	2.71700667 1.000000	2.71700667 1.000000
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
1.02287486 1.000000	1.02287486 1.000000	1.02287486 1.000000
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
.39669045 1.000000	.39669045 1.000000	.39669045 1.000000
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
.15848145 1.000000	.15848145 1.000000	.15848145 1.000000
d 1 1.0	d 1 1.0	d 1 1.0
4.12431288 1.000000	4.12431288 1.000000	4.12431288 1.000000
d 1 1.0	d 1 1.0	d 1 1.0
1.68042062 1.000000	1.68042062 1.000000	1.68042062 1.000000
f 1 1.0	f 1 1.0	f 1 1.0
0.66111449 1.000000	1.68042062 1.000000	4.12431288 1.000000

Átomo de Flúor s4	Átomo de Flúor s5	Átomo de Flúor s6
F 0	F 0	F 0
s 8 1.0	s 8 1.0	s 8 1.0
.1253180E+06 .4639304E-04	.1253180E+06 .4639304E-04	.1253180E+06 .4639304E-04
.2060601E+05 .3518620E-03	.2060601E+05 .3518620E-03	.2060601E+05 .3518620E-03
.4429130E+04 .1991471E-02	.4429130E+04 .1991471E-02	.4429130E+04 .1991471E-02
.1244477E+04 .8106540E-02	.1244477E+04 .8106540E-02	.1244477E+04 .8106540E-02
.4101958E+03 .2777441E-01	.4101958E+03 .2777441E-01	.4101958E+03 .2777441E-01
.1476485E+03 .8237795E-01	.1476485E+03 .8237795E-01	.1476485E+03 .8237795E-01
.5651170E+02 .1838542E+00	.5651170E+02 .1838542E+00	.5651170E+02 .1838542E+00
.2299955E+02 .2437778E+00	.2299955E+02 .2437778E+00	.2299955E+02 .2437778E+00
s 5 1.0	s 5 1.0	s 5 1.0
.4101958E+03 -.1041103E-03	.4101958E+03 -.1041103E-03	.4101958E+03 -.1041103E-03
.1476485E+03 -.8781763E-03	.1476485E+03 -.8781763E-03	.1476485E+03 -.8781763E-03
.5651170E+02 -.6465249E-02	.5651170E+02 -.6465249E-02	.5651170E+02 -.6465249E-02
.2299955E+02 -.2881137E-01	.2299955E+02 -.2881137E-01	.2299955E+02 -.2881137E-01
.9774116E+01 -.8271995E-01	.9774116E+01 -.8271995E-01	.9774116E+01 -.8271995E-01
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
4.12431288 1.000000	4.12431288 1.000000	4.12431288 1.000000
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
1.68042062 1.000000	1.68042062 1.000000	1.68042062 1.000000
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
0.66111449 1.000000	0.66111449 1.000000	0.66111449 1.000000
s 1 1.0	s 1 1.0	s 1 1.0
0.25114679 1.000000	0.25114679 1.000000	0.25114679 1.000000
p 4 1.0	p 4 1.0	p 4 1.0
182.02787318 0.00128395	182.02787318 0.00128395	182.02787318 0.00128395
60.85271201 0.00609615	60.85271201 0.00609615	60.85271201 0.00609615
20.95653229 0.03065703	20.95653229 0.03065703	20.95653229 0.03065703
7.43457836 0.11610178	7.43457836 0.11610178	7.43457836 0.11610178
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
2.71700667 1.000000	2.71700667 1.000000	2.71700667 1.000000
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
1.02287486 1.000000	1.02287486 1.000000	1.02287486 1.000000
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
.39669045 1.000000	.39669045 1.000000	.39669045 1.000000
p 1 1.0	p 1 1.0	p 1 1.0
.15848145 1.000000	.15848145 1.000000	.15848145 1.000000
d 1 1.0	d 1 1.0	d 1 1.0
9.774116 1.000000	9.774116 1.000000	9.774116 1.000000
d 1 1.0	d 1 1.0	d 1 1.0
4.12431288 1.000000	4.12431288 1.000000	4.12431288 1.000000
f 1 1.0	f 1 1.0	f 1 1.0
1.68042062 1.000000	4.12431288 1.000000	9.774116 1.000000

Átomo de Flúor p1		Átomo de Flúor p2		Átomo de Flúor p3	
F 0		F 0		F 0	
s 8 1.0		s 8 1.0		s 8 1.0	
.1253180E+06	.4639304E-04	.1253180E+06	.4639304E-04	.1253180E+06	.4639304E-04
.2060601E+05	.3518620E-03	.2060601E+05	.3518620E-03	.2060601E+05	.3518620E-03
.4429130E+04	.1991471E-02	.4429130E+04	.1991471E-02	.4429130E+04	.1991471E-02
.1244477E+04	.8106540E-02	.1244477E+04	.8106540E-02	.1244477E+04	.8106540E-02
.4101958E+03	.2777441E-01	.4101958E+03	.2777441E-01	.4101958E+03	.2777441E-01
.1476485E+03	.8237795E-01	.1476485E+03	.8237795E-01	.1476485E+03	.8237795E-01
.5651170E+02	.1838542E+00	.5651170E+02	.1838542E+00	.5651170E+02	.1838542E+00
.2299955E+02	.2437778E+00	.2299955E+02	.2437778E+00	.2299955E+02	.2437778E+00
s 5 1.0		s 5 1.0		s 5 1.0	
.4101958E+03	-.1041103E-03	.4101958E+03	-.1041103E-03	.4101958E+03	-.1041103E-03
.1476485E+03	-.8781763E-03	.1476485E+03	-.8781763E-03	.1476485E+03	-.8781763E-03
.5651170E+02	-.6465249E-02	.5651170E+02	-.6465249E-02	.5651170E+02	-.6465249E-02
.2299955E+02	-.2881137E-01	.2299955E+02	-.2881137E-01	.2299955E+02	-.2881137E-01
.9774116E+01	-.8271995E-01	.9774116E+01	-.8271995E-01	.9774116E+01	-.8271995E-01
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
4.12431288	1.000000	4.12431288	1.000000	4.12431288	1.000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
1.68042062	1.000000	1.68042062	1.000000	1.68042062	1.000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.66111449	1.000000	0.66111449	1.000000	0.66111449	1.000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.25114679	1.000000	0.25114679	1.000000	0.25114679	1.000000
p 4 1.0		p 4 1.0		p 4 1.0	
182.02787318	0.00128395	182.02787318	0.00128395	182.02787318	0.00128395
60.85271201	0.00609615	60.85271201	0.00609615	60.85271201	0.00609615
20.95653229	0.03065703	20.95653229	0.03065703	20.95653229	0.03065703
7.43457836	0.11610178	7.43457836	0.11610178	7.43457836	0.11610178
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
2.71700667	1.000000	2.71700667	1.000000	2.71700667	1.000000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
1.02287486	1.000000	1.02287486	1.000000	1.02287486	1.000000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.39669045	1.000000	.39669045	1.000000	.39669045	1.000000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.15848145	1.000000	.15848145	1.000000	.15848145	1.000000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
2.71700667	1.000000	2.71700667	1.000000	2.71700667	1.000000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
1.02287486	1.000000	1.02287486	1.000000	1.02287486	1.000000
f 1 1.0		f 1 1.0		f 1 1.0	
.39669045	1.000000	1.02287486	1.000000	2.71700667	1.000000

<i>Átomo de Flúor p4</i>		<i>Átomo de Flúor p5</i>		<i>Átomo de Flúor p6</i>	
F 0		F 0		F 0	
s 8 1.0		s 8 1.0		s 8 1.0	
.1253180E+06	.4639304E-04	.1253180E+06	.4639304E-04	.1253180E+06	.4639304E-04
.2060601E+05	.3518620E-03	.2060601E+05	.3518620E-03	.2060601E+05	.3518620E-03
.4429130E+04	.1991471E-02	.4429130E+04	.1991471E-02	.4429130E+04	.1991471E-02
.1244477E+04	.8106540E-02	.1244477E+04	.8106540E-02	.1244477E+04	.8106540E-02
.4101958E+03	.2777441E-01	.4101958E+03	.2777441E-01	.4101958E+03	.2777441E-01
.1476485E+03	.8237795E-01	.1476485E+03	.8237795E-01	.1476485E+03	.8237795E-01
.5651170E+02	.1838542E+00	.5651170E+02	.1838542E+00	.5651170E+02	.1838542E+00
.2299955E+02	.2437778E+00	.2299955E+02	.2437778E+00	.2299955E+02	.2437778E+00
s 5 1.0		s 5 1.0		s 5 1.0	
.4101958E+03	-.1041103E-03	.4101958E+03	-.1041103E-03	.4101958E+03	-.1041103E-03
.1476485E+03	-.8781763E-03	.1476485E+03	-.8781763E-03	.1476485E+03	-.8781763E-03
.5651170E+02	-.6465249E-02	.5651170E+02	-.6465249E-02	.5651170E+02	-.6465249E-02
.2299955E+02	-.2881137E-01	.2299955E+02	-.2881137E-01	.2299955E+02	-.2881137E-01
.9774116E+01	-.8271995E-01	.9774116E+01	-.8271995E-01	.9774116E+01	-.8271995E-01
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
4.12431288	1.000000	4.12431288	1.000000	4.12431288	1.000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
1.68042062	1.000000	1.68042062	1.000000	1.68042062	1.000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.66111449	1.000000	0.66111449	1.000000	0.66111449	1.000000
s 1 1.0		s 1 1.0		s 1 1.0	
0.25114679	1.000000	0.25114679	1.000000	0.25114679	1.000000
p 4 1.0		p 4 1.0		p 4 1.0	
182.02787318	0.00128395	182.02787318	0.00128395	182.02787318	0.00128395
60.85271201	0.00609615	60.85271201	0.00609615	60.85271201	0.00609615
20.95653229	0.03065703	20.95653229	0.03065703	20.95653229	0.03065703
7.43457836	0.11610178	7.43457836	0.11610178	7.43457836	0.11610178
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
2.71700667	1.000000	2.71700667	1.000000	2.71700667	1.000000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
1.02287486	1.000000	1.02287486	1.000000	1.02287486	1.000000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.39669045	1.000000	.39669045	1.000000	.39669045	1.000000
p 1 1.0		p 1 1.0		p 1 1.0	
.15848145	1.000000	.15848145	1.000000	.15848145	1.000000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
7.43457836	1.000000	7.43457836	1.000000	7.43457836	1.000000
d 1 1.0		d 1 1.0		d 1 1.0	
1.02287486	1.000000	1.02287486	1.000000	1.02287486	1.000000
f 1 1.0		f 1 1.0		f 1 1.0	
2.71700667	1.000000	7.43457836	1.000000	1.02287486	1.000000

