UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE QUÍMICA DE SÃO CARLOS

**Geração de conjuntos de base para alguns átomos do 5º e 6º períodos da
tabela periódica utilizando o Método da Coordenada Geradora polinomial
Hartree-Fock**

São Carlos

2017

Júlia Maria Aragon Alves

Júlia Maria Aragon Alves

Geração de conjuntos de base para alguns átomos do 5º e 6º períodos da tabela periódica utilizando o Método da Coordenada Geradora polinomial Hartree-Fock

Dissertação apresentada ao Instituto de Química de São Carlos da Universidade São Paulo como parte dos requisitos para a obtenção do título de mestre em ciências.

Área de concentração: Físico-Química

Orientador: Prof. Dr. Albérico Borges Ferreira da Silva

São Carlos,

2017

Dedicatória

Dedico essa dissertação à minha mãe, Luciana Maria Campana Aragon, ao meu noivo, Leonnam Gotardo Merízio e a sua família cujo apoio foi fundamental para a conclusão deste trabalho.

Agradecimentos

Agradeço imensamente à minha mãe, Luciana Maria Campana Aragon, ao meu noivo, Leonnam Gotardo Merízio e minha sogra, Ivete Gotardo Merízio e aos meus familiares pelo total apoio (psicológico, emocional e financeiro). Gostaria de agradecer também aos meus amigos capixabas, aos amigos do laboratório e amigos “são carlenses”, pelos ensinamentos adquiridos e o apoio prestado. Agradeço também ao meu orientador, prof. Dr. Albérico Borges Ferreira da Silva, pela paciência e por compartilhar o seu conhecimento comigo. Finalmente, agradeço à CNPq, pela bolsa concedida e ao CEMEAI ICMC USP pelo cluster, onde os cálculos moleculares foram realizados.

“...Couldn't be much more from the heart...

...Forever trusting who we are...

... Open mind for a different view...

... And nothing else matters. ”

Nothing else matters - Metallica

Resumo

A equação de Schrödinger possui solução exata para átomos monoelétrônicos, porém devido ao nível de complexidade das soluções para átomos polieletrônicos e moléculas houve a necessidade de métodos aproximados que descrevessem satisfatoriamente as propriedades de interesse. O Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock (MCG-HF) é um método variacional que permitiu desenvolver conjuntos de base acurados para átomos, entretanto, utilizando apenas a discretização integral, os conjuntos de base requeriam um maior número de expoentes, deixando-os extensos. Barbosa e da Silva (2009) introduziram o conceito de discretização integral polinomial que diminuiu a quantidade de expoentes necessários para descrever adequadamente um átomo, gerando conjuntos de base menores. Os conjuntos de primitivas gerados pelo p-MCG-HF foram contraídos utilizando o método de contração geral para a qualidade 5Z e em seguida, polarizados, utilizando dois métodos de polarização, ou seja, a pinçada e otimizada, para descrever melhor propriedades químicas como ligação química, estados excitados, entre outros. As energias obtidas por esses métodos de polarização são semelhantes, porém o tempo computacional é menor para a polarização pinçada (na maioria dos casos). Ao comparar os resultados obtidos neste trabalho com aqueles da literatura, os resultados obtidos utilizando o p-MCG-HF são de alta qualidade e com a enorme vantagem de ter tempo computacionais muito reduzidos. Esse método já está sendo aplicado por este grupo de pesquisa para gerar conjunto base para átomos do 1º ao 2º períodos da tabela periódica e os metais de transição e têm demonstrado resultados satisfatórios. Então, no intuito de estudar todos os átomos da tabela periódica até o bário, os átomos Gálio, Germânio, Arsênio, Selênio, Bromo, Criptônio, Rubídio, Estrôncio, Índio, Estanho, Antimônio, Telúrio, Iodo, Xenônio, Césio e Bário serão o foco deste trabalho.

Palavras-chave: Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock, Discretização Integral Polinomial, Conjunto de Primitivas, Contração Geral, Polarização Pinçada.

Abstract

The Schrödinger equation has exact solution for monoelectronic atoms, but the high complexity for the exact solution for many electron systems, lead to the use of approximation methods that satisfactorily. The Hartree-Fock Generating Coordinate Method (MCG-HF) is a variational method that allows the development of accurate basis sets for atoms with many electrons. However, using only an integral discretization, the basis sets generated with the MCG-HF requires a larger number of exponentes. Barbosa and da Silva (2009) introduced the concept of integral polynomial discretization that reduced the amount of exponents required to properly describe an atom, generating smaller basis sets. The sets of primitives generated with p-MCG-HF were contracted using the general contraction method for 5Z quality and then polarized using two different polarization methods (pinched and optimized) to better describe chemical properties such as chemical bonding, excited states, etc. The energies obtained with these polarization methods are similar, but the computational cost is smaller for pinched polarization (in most cases). Comparing the results obtained in this work with those of the literature, the results obtained by using the p-MCG-HF have a high quality and a large advantage of having very reduced computational cost. This method is already being applied in ours research group to generate basis set for atoms of the 1st to 2nd period of the periodic table and the transition metals showing satisfactory results. In order to study all the atoms in the periodic table, the atoms Gallium, Germanium, Arsenic, Selenium, Bromine, Crypton, Rubidium, Strontium, Indium, Tin, Antimony, Tellurium, Iodine, Xenium, Cesium and Barium will be focused in this work.

Keywords: Hartree-Fock Generating Coordinate Method, Polynomial Integral Discretization, Primitive Set, General Contraction, Pinched Polarization.

Lista de Tabelas

Tabela 1 - Comparação entre malhas de 3 e 4 incrementos (1 Hartree = 27,21eV).....	33
Tabela 2 - Comparação entre energias de Bases Universal (preto) e Partridge (vermelho) em Hartree (1 Hartree = 27,21eV) para todos os átomos	34
Tabela 3 - Esquema de contração e suas energias em Hartree para cada átomo (1 Hartree = 27,21eV).....	38
Tabela 4 - Comparação entre as energias em Hartree entre os dois conjuntos de primitivas e o conjunto de base cc-pv5Z (1 Hartree = 27,21eV).....	40
Tabela 5 - Diferença entre os expoentes de duas otimizações de malhas diferentes.....	41
Tabela 6 - Cálculo de energia em Hartree utilizando conjunto de bases da literatura (1 Hartree = 27,21eV).....	46
Tabela 7- Comparação entre as energias em Hartree obtidas pelo p-MCG-HF e os melhores resultados da literatura e os erros entre os conjuntos de base (1 Hartree = 27,21eV)	49
Tabela 8 - Alteração da energia em Hartree ao se adicionar as funções de polarização (1 Hartree = 27,21eV).....	52
Tabela 9 - Comparação entre as energias em Hartree obtidas dos conjuntos de base antes e depois da polarização (1 Hartree = 27,21eV).....	53
Tabela 10 - Comparação entre as energias em Hartree obtidas por ambas polarizações (1 Hartree = 27,21eV).....	54
Tabela 11 - Comparação entre os expoentes obtidos pela polarização pinçada e otimizada ...	54
Tabela 12 - Comparação entre as energias em Hartree geradas por diferentes metodologias (1 Hartree = 27,21eV)	55
Tabela 13 - Alteração da energia em Hartree ao se adicionar as funções de polarização e o tempo computacional (1 Hartree = 27,21eV).....	66

Lista de Figuras

Figura 1 - Exemplo de input do programa ATOM-SCF	30
--	----

Lista dos Gráficos

Gráfico 1 - Variação da energia em Hartree para o átomo de Gálio ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV).....	35
Gráfico 2 - Variação da energia em Hartree do átomo de Estanho ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV).....	36
Gráfico 3 - Diferença entre as energias em Hartree antes (coluna 1) e depois (coluna 2) de otimizar a malha até a convergência (1 Hartree = 27,21eV).....	37
Gráfico 4 - Diferença da energia em Hartree entre os esquemas de purificação (1 Hartree = 27,21eV)	39
Gráfico 5 - Comparação entre os valores de expoente para cada orbital	43
Gráfico 6 - Comparação entre o tempo computacional em segundos (laranja) e a energia em Hartree obtida (azul) (1 Hartree = 27,21eV)	47
Gráfico 7 - Comparação entre o tempo computacional em segundos e a energia em Hartree obtida por cada um dos melhores conjuntos de base (1 Hartree = 27,21eV)	50
Gráfico 8 - Comparação entre as energias em Hartree obtidas do conjunto de base p-MCG-HF (1 Hartree = 27,21eV)	51
Gráfico 9 - Variação da energia em Hartree do átomo de Germânio ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV).....	61
Gráfico 10 - Variação da energia em Hartree do átomo de Arsênio ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV).....	61
Gráfico 11-Variação da energia em Hartree do átomo de Selênio ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV).....	61
Gráfico 12 - Variação da energia em Hartree do átomo de Bromo ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV).....	62
Gráfico 13 - Variação da energia em Hartree do átomo de Criptônio ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV).....	62
Gráfico 14 - Variação da energia em Hartree do átomo de Estrôncio ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV).....	62
Gráfico 15 - Variação da energia em Hartree do átomo de Rubídio ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV).....	63
Gráfico 16 - Variação da energia em Hartree do átomo de Índio ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV).....	63

Gráfico 17 - Variação da energia em Hartree do átomo de Estanho ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV).....	63
Gráfico 18 - Variação da energia em Hartree do átomo de Antimônio ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV).....	64
Gráfico 19 - Variação da energia em Hartree do átomo de Telúrio ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV).....	64
Gráfico 20 - Variação da energia em Hartree do átomo de Iodo ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV).....	64
Gráfico 21 - Variação da energia em Hartree do átomo de Xenônio ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV).....	65
Gráfico 22 - Variação da energia em Hartree do átomo de Césio ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV).....	65
Gráfico 23 - Variação da energia em Hartree do átomo de Bário ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV).....	65

Lista de Abreviaturas e Siglas

STFs- do inglês *Slater-Type Function*

GTFs- do inglês *Gaussian-Type Function*

HF- Hartree-Fock

SCF- do inglês *Self-Consistent-Field*

MCG-HF- Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock

p- MCG-HF- Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock polinomial

MCG- Método da Coordenada Geradora

GHW- Griffin-Hill-Wheeler

GHW-HF - Griffin-Hill-Wheeler-Hartree-Fock

CI - Interação de Configurações

CISD - Interação de Configurações Simples e Duplas

DFT - Teoria do Funcional da Densidade

DV- Discretização Variacional

DI- Discretização Integral

DIP- Discretização Integral Polinomial

DZ- Duplo zeta

TZ- Triplo zeta

5Z- Quíntuplo zeta

Sumário

1	Introdução.....	15
1.1	Histórico	15
1.2	Conjuntos de base	17
1.3	Método da Coordenada Geradora – Hartree-Fock (MCG-HF)	21
1.4	Discretização Integral Polinomial e a Troca de Rótulos	26
2	Objetivo	29
	Objetivos Específicos	29
3	Metodologia.....	30
4	Resultados e Discussões.....	33
4.1	Geração dos Conjuntos de Primitivas	33
4.2	Contração	38
4.3	Polarização	40
5	Conclusão	56
6	Referência.....	57
	APÊNDICE A.....	61
	APÊNDICE B	66
	APÊNDICE C.....	68

1 Introdução

1.1 Histórico

Em seus estudos, no final do século XVII, Isaac Newton propôs algumas leis que regiam os fenômenos físicos observados na época, instituindo assim, a mecânica clássica. Para os objetos macroscópicos as leis newtonianas funcionavam satisfatoriamente, entretanto, com aumento da tecnologia e o aprimoramento dos experimentos, constatou-se que a mecânica clássica falhava ao descrever algumas situações envolvendo corpos muito pequenos (moléculas, átomos e partículas subatômicas) por supor que estes corpos também se moviam de forma contínua. Deste modo, houve a necessidade de propor um novo modelo, a mecânica quântica, no início do século XX.^{1,2}

A mecânica quântica teve início em 1900 com Max Planck que observou que os corpos emitiam ou absorviam somente uma quantidade de energia discreta, ou quantizada, proporcional a $n h \nu$, onde h é a constante de Planck, n é o número quântico ($n = 1, 2, 3, \dots$) e ν a frequência. Logo depois, em 1924, Louis de Broglie sugeriu que as partículas teriam um comportamento dual, podendo ser interpretada ora como partícula, ora como onda.^{1,3,4}

A descoberta do princípio da incerteza por Werner Heisenberg, em 1927, também foi crucial para o desenvolvimento da mecânica quântica. Ele constatou que devido à característica dual da partícula, não é possível mensurar simultaneamente e com a mesma precisão da constante de Planck, a posição e o momento de corpos muito pequenos (como elétrons), ou seja, para corpos muito pequenos não faz sentido falar de precisão sendo mais apropriado trabalhar com probabilidade.^{1,2}

Em 1925, Erwin Schrödinger elaborou ideias gerais sobre a teoria quântica por meio de equações diferenciais. Por ser baseada no princípio de dualidade da partícula, a equação de Schrödinger descreve a partícula como uma onda e assim como na mecânica clássica, a chamada função de onda (Ψ) proposta por ele também descreve diversas propriedades físicas do sistema. Resolver essa equação é encontrar uma função de onda Ψ que descreva o sistema a ser estudado, porém, a solução exata existe somente para o átomo de hidrogênio ou sistemas monoelétrônicos.^{1,2} Essa função em si não tem significado físico, entretanto, o seu módulo ao quadrado expressa a densidade de

probabilidade eletrônica do sistema, concordando mais uma vez com a teoria formulada na época.^{1,2}

A equação de Schrödinger, equação 1, é uma equação de autovalores onde Ψ é a autofunção (também conhecida como função de onda), o E é o autovalor e o $\hat{H}$ é o operador que expressa, respectivamente, a energia cinética dos elétrons, atração elétron-núcleo e repulsão intereletrônica (pares distintos), que deve ser hermitiano. É possível calcular quaisquer outras propriedades desde que seja utilizado operadores apropriados.^{1,2}

$$\hat{H}_{el}\Psi = E\Psi \quad (1)$$

$$\text{Onde } \hat{H}_{el} = \frac{-h^2}{8\pi^2m_e} \sum_{i=1}^n \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^n \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}$$

Para átomos multieletrônicos, a complexidade do termo de repulsão intereletrônica presente no operador Hamiltoniano aumenta de forma a se tornar impraticável o cálculo da função de onda exata para esses sistemas. Portanto houve a necessidade de se estudar diferentes métodos, aproximações e ainda utilizar tipos distintos de funções para obter uma função de onda que descreve satisfatoriamente o sistema atômico ou molecular.¹

Neste trabalho, foi usado o método da coordenada geradora Hartree-Fock polinomial, p-MCG-HF para gerar funções de base primitivas para os átomos: Gálio, Germânio, Arsênio, Selênio, Bromo, Criptônio, Rubídio, Estrôncio, Índio, Estanho, Antimônio, Telúrio, Iodo, Xenônio, Césio e Bário, para então realizar a contração e a polarização dessas bases.

1.2 Conjuntos de base

Ao resolver a equação de Schrödinger para átomos monoelétrônicos (equação 1), foi observado que a função de onda é composta por uma parte de spin e outra parte espacial, representada por uma parte radial (R) e uma angular (Y), onde n , l e m são respectivamente os números quânticos principal, azimutal e magnético, como observado na equação abaixo:¹

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{(n,l)} Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (2)$$

As funções $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ são conhecidas como funções harmônicas esféricas e são escritas da seguinte forma:

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = N_{l,m} P_l^{(m)}(\cos \theta) l^{im\varphi} \quad (3)$$

Onde $N_{l,m}$ é um fator de normalização e as funções $P_l^{(m)}(\cos \theta)$ são os polinômios associados de Legendre.

Existem diversas formas de representar a parte radial da função de onda, dependendo do objetivo do estudo, entretanto as funções do tipo Slater (STF) e as do tipo Gaussianas (GTF), descritas respectivamente abaixo, são as duas mais utilizadas para esse tipo de estudo.

$$\Psi_{(r,\theta,\varphi)} = N r^{n-1} e^{-\alpha r} Y_{(\theta,\varphi)}^{l,m_l} \quad (4)$$

$$\Psi_{(r,\theta,\varphi)} = N r^{n-1} e^{-\alpha r^2} Y_{(\theta,\varphi)}^{l,m_l} \quad (5)$$

Por mais que as fórmulas matemáticas para se calcular as funções sejam semelhantes, as STF são mais precisas, descrevem melhor o sistema usando um número menor de funções, contudo, apresentam complicações para sistemas com muitos corpos se tornando muitas vezes impraticável. As GTF, por outro lado, precisam de um maior número de funções para descrever o sistema, entretanto, existe a possibilidade de fazer uma combinação linear de funções Gaussianas que gera uma nova função Gaussiana correspondente centrada em um ponto intermediário às funções, processo conhecido como contração, que diminui o conjunto de base, mantendo a precisão e diminuindo o custo computacional, além disto, com o uso da GTF o problema das integrais de muitos corpos é eliminado.

Em 1951, Roothaan sugeriu que os orbitais fossem escritos como uma combinação de um conjunto completo funções (STF ou GTF) já conhecidas, chamado de conjunto de base. Na equação abaixo, c é o coeficiente da expansão gerado naturalmente pelo cálculo e χ é o conjunto completo de funções.^{1,9}

$$\Phi = \sum_{i=1} c_i \chi_i \quad (6)$$

Contudo, é inviável conhecer as infinitas funções de onda de um conjunto completo. Portanto, para representar um átomo, é necessário de no mínimo uma função para descrever cada orbital, por exemplo, se o objetivo fosse estudar o nitrogênio deveria haver no mínimo 3 funções, uma para cada orbital preenchido, $1s^2, 2s^2 e 2p^3$. Este conjunto de base é conhecido como conjunto de base mínimo ou Single-Zeta e obviamente, não representa o átomo apropriadamente.

Após encontrar a quantidade ideal de funções de onda para melhor descrever o átomo, para cada simetria existente (s, p, d, f), um conjunto de expoentes α é gerado, formando assim um conjunto de base não contraído ou conjunto de primitivas. Como foi utilizada funções do tipo Gaussiana, espera-se que este conjunto de primitiva seja extenso, o que poderia deixar um cálculo molecular muito custoso ou impraticável. Para superar este desafio, o método da contração é utilizado, podendo gerar conjuntos de base de diferentes qualidades.

A qualidade de um conjunto de base depende do número de expoentes que serão empregados para descrever cada orbital depois da contração. Em uma base denominada Duplo-Zeta (DZ), cada orbital é retratado por apenas 2 funções de onda, uma função gerada após a contração e mais uma função primitiva do conjunto original. Seguindo este raciocínio, uma base chamada Triplo-Zeta (TZ) usará apenas 3 funções para descrever cada orbital (uma função gerada depois da contração e mais 2 funções do conjunto de primitiva original) e assim sucessivamente para as bases de qualidade *N-Zeta* (N=4, 5, 6, ...). Além destas, existem outros tipos de conjuntos base como a *split-valance* que descreve separadamente a região do caroço e a valência, utilizando, diferentes esquemas de contração para cada local.

É natural imaginar que quanto maior a qualidade da base, maior será a precisão com que ela descreverá o átomo/molécula, porém, apesar deste pensamento estar correto,

é importante ressaltar que com o aumento da qualidade, existe também um aumento no tempo computacional.

A contração é uma importante etapa para a construção do conjunto de base por diminuir o número funções e melhorar o desempenho computacional, uma vez que o tempo de CPU aumenta na grandeza de N^4 ou até mesmo N^5 , onde N é o número de expoentes.⁵

No processo de contração, os expoentes do conjunto de primitivas são agregadas conforme a simetria (s, p, d, f...) por uma combinação linear. Existem duas formas de agregar esses expoentes, o método de contração geral e o método de contração segmentada. No primeiro método, todas as funções primitivas podem contribuir para a formação de todas as funções contraídas, já no segundo caso, há uma divisão de regiões dentro do conjunto não contraído fazendo com que nem todas as funções primitivas contribuam para a formação de todas as funções contraídas.⁵

O Método da Contração Segmentada possui algumas regras, fisicamente embasadas, para o desenvolvimento dos conjuntos de base:

- Para descrever melhor as regiões mais afastadas do núcleo (orbitais mais difusos), as funções devem permanecer não contraídas, pois esta região está sujeita a sofrer influência de outros núcleos.
- Funções primitivas que contribuem consideravelmente para mais de um orbitais atômicos devem fazer parte das funções contraídas referentes a esses orbitais, por descrever uma região no espaço que é considerada importante para descrever as propriedades do sistema.

Apesar de ser um método baseado em regras de fácil aceitação ele caiu em desuso devido à complexidade para executá-lo pois era preciso estudar as regiões de contração, além da necessidade de utilizar um maior número de funções de onda para obter uma boa descrição das propriedades, uma vez que cada função poderia descrever mais de um orbital. Portanto, neste trabalho será usado o método de contração geral por gerar melhores resultados.^{5,17}

Entretanto, apenas contrair o conjunto de base não garante que este conjunto descreverá adequadamente o ambiente molecular, sendo necessário adicionar expoentes

de momento angular, l , maior que os encontrados no conjunto original. Esse procedimento é chamado de polarização e auxilia a desenhar os orbitais não esféricos e a reproduzir estados excitados, ligações químicas, energias de dissociação, dentre outros.

É importante ressaltar que devido à dificuldade de desenvolver esses conjuntos de primitivas existem poucos exemplos na literatura de bases para esses átomos e é ainda mais raro encontrar conjuntos de base contraídos e polarizados. Espera-se que estes conjuntos de base tenham uma alta precisão aliado a um baixo tempo computacional, podendo ser aplicados em outros estudos teóricos, contribuindo assim, com o banco de dados já existente.

1.3 Método da Coordenada Geradora – Hartree-Fock (MCG-HF)

Sabe-se que para átomos polieletrônicos a equação de Schrödinger não pode ser resolvida exatamente, portanto houve a necessidade de estudar diferentes métodos para encontrar as funções de onda que melhor descrevem o sistema a ser estudado.

Os métodos utilizados podem ser segregados em 3 grupos distintos:

- *Ab initio*: Resolve as integrais de forma analítica ou numérica, utilizando poucas aproximações e possui um alto custo computacional;
- Semi-empírico: Utiliza dados experimentais para aproximar o valor de algumas integrais diminuindo o tempo computacional;
- Mecânica Molecular: Faz uso da mecânica clássica para realizar algumas aproximações.

Pelo teorema do valor médio pode-se encontrar o valor da função de onda aproximada do sistema da seguinte forma:¹

$$\hat{H}\Psi_{aprox} = E_{aprox}\Psi_{aprox} \quad (7)$$

Multiplicando ambos os lados pelo complexo conjugado de Ψ_{aprox} :

$$\Psi_{aprox}^* \hat{H} \Psi_{aprox} = E_{aprox} \Psi_{aprox}^* \Psi_{aprox} \quad (8)$$

Integrando ambos os lados e isolando E_{aprox}

$$E_{aprox} = \frac{\langle \Psi_{aprox} | \hat{H} | \Psi_{aprox} \rangle}{\langle \Psi_{aprox} | \Psi_{aprox} \rangle} \quad (9)$$

O método variacional garante que a energia aproximada de uma função aproximada, normalizada e bem-comportada, encontrada após o cálculo será sempre maior ou no máximo igual à energia real do sistema. Porém ainda existe uma dificuldade por não ser possível resolver exatamente a equação de Schrödinger para átomo com mais de um elétron, não se sabe qual é a energia real, E_{real} , dos átomos multieletrônicos.¹

Entretanto, se for possível obter os conjuntos de funções tentativas $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots$, que resultem nas energias aproximadas $E_1, E_2, E_3, \dots$, utilizando o método variacional sabe-se que a melhor função aproximada será aquela cuja energia aproximada é a menor possível, por este valor estar o mais próximo possível do valor exato.¹

É preciso ter cuidado, pois a energia aproximada converge mais rapidamente para a energia real do que a função de onda aproximada converge para a função de onda real. O teorema do valor médio, contudo, é uma metodologia muito simples e pouco empregada para propor funções de onda.

Douglas R. Hartree propôs em 1928, o método do campo autoconsistente (SCF) para obter melhores soluções para a equação de Schrödinger considerando as interações intereletrônicas. Este é um método iterativo, onde uma forma inicial para as funções é proposta, como um “chute”, e a partir deste ponto as equações são resolvidas variacionalmente até encontrar um novo conjunto de funções que serão utilizadas como funções iniciais, este procedimento é repetido até haver a convergência dos valores.¹⁶

Vladimir A. Fock e John C. Slater, em 1930, complementaram a ideia de Hartree, fazendo algumas correções ao método. Este método é conhecido como método Hartree-Fock (HF) e é fundamentado em cinco aproximações principais.¹⁶ A primeira consiste em considerar que a função de onda de um sistema com n elétrons, $\Psi_{(r_1 r_2, \dots, r_n)}$, é descrita por um determinante de Slater, garantindo que as funções serão anti-simétricas:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} u_1(1) & u_2(1) & \dots & u_n(1) \\ u_1(2) & u_2(2) & \dots & u_n(2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_1(n) & u_2(n) & \dots & u_n(n) \end{vmatrix} \quad (10)$$

Onde $\frac{1}{\sqrt{n!}}$ é o fator de normalização e u é um spin-orbital, ou seja, uma função escrita não apenas pelas coordenadas espaciais mas também por coordenadas de spin, α (*spin up*, $\uparrow$) ou β (*spin down*, $\downarrow$), como observado na equação abaixo:

$$u(n) = \psi(n)\alpha(n) \text{ ou } \bar{u}(n) = \psi(n)\beta(n) \quad (11)$$

A segunda aproximação é em relação à construção do operador Hamiltoniano do sistema, este não descreve os efeitos relativísticos e de spin-orbita, fazendo com que este hamiltoniano seja completamente não relativístico. Ademais, as interações eletrônicas retratadas por este operador são descritas usando a aproximação do campo médio, ou seja, utiliza-se um campo médio para descrever a interação que um conjunto de partículas tem sobre outra partícula individual, transformando um problema de interação de muitos corpos em vários problemas de um único corpo de solução mais simples. Assim sendo, a equação a seguir mostra o operador Hamiltoniano HF, em unidades atômicas:

$$\hat{H} = -\sum_i^n \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_a^m \frac{1}{2M_a} \nabla_a^2 - \sum_i^n \sum_a^m \frac{Z_a}{r_{ia}} + \sum_i^n \sum_{j>i}^n \frac{1}{r_{ij}} + \sum_a^m \sum_{b>a}^m \frac{Z_a Z_b}{R_{ab}} \quad (12)$$

Onde M_a é a razão entre a massa do núcleo a e a massa de um elétron, Z_a é o número atômico do núcleo a , ∇_i^2 e ∇_a^2 são os operadores Laplacianos para os elétrons i e núcleos a (representam a energia cinética dos elétrons e dos núcleos, respectivamente), o terceiro termo refere-se à atração coulômbica entre elétrons e núcleos e os últimos dois termos representam a repulsão eletrônica elétron-elétron e núcleo-núcleo, nesta ordem.

Ao olhar atentamente para a equação 12, é possível imaginar que devido à grande diferença entre a massa do elétron e a massa do núcleo, sendo a massa do elétron muito menor, o núcleo se move muito mais lentamente que o elétron, ao ponto de ser razoável considerar que os núcleos são fixos, enquanto os elétrons se movem. Essa aproximação é conhecida como aproximação de Born-Oppenheimer e é a quarta aproximação existente no método HF, resumindo o hamiltoniano molecular em um hamiltoniano do problema eletrônico:

$$\hat{H}_{el} = -\sum_i^n \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_i^n \sum_a^m \frac{Z_a}{r_{ia}} + \sum_i^n \sum_{j>i}^n \frac{1}{r_{ij}} \quad (13)$$

A última aproximação, e quiçá a mais importante, foi proposta por Roothaan que sugeriu utilizar conjunto de base em vez de uma função de onda, ajudando a descrever melhor os sistemas em estudo (equação 6).

Com o objetivo de alcançar a melhor energia, o método HF é calculado variacionalmente a partir do teorema do valor médio.

O método HF pode ser solucionado através de métodos numéricos, Hartree-Fock Numérico (NHF), e existem várias metodologias que são empregadas nos cálculos numéricos. Este método será usado para comparação com os resultados obtidos nesta pesquisa, então quanto mais próxima a energia obtida esta do NHF, melhor o resultado.^{25, 26, 27}

Em 1957, Griffin, Hill e Wheeler introduziram o método da coordenada geradora, MCG, um método variacional com o propósito de associar o movimento coletivo com o das partículas individuais. Porém, a solução desta equação não é trivial, sendo raros os exemplos de soluções analíticas, se tornando comum a utilização de procedimentos numéricos.^{6,11,15,20}

Por volta de 1986, Mohallem, Dreizler e Trsic, modificaram o MGG introduzindo o método da coordenada geradora Hartree-Fock, MCG-HF, no intuito de promover a pesquisa por conjuntos de base mais compactos e ainda sim precisos, este é um método poderoso para gerar tanto STF quanto GTF, como mostra a literatura.^{6,8,14}

As equações deste método são conhecidas como equações Griffin-Wheeler Hartree-Fock (GW-HF) e suas funções de onda são escritas da seguinte forma:

$$\psi_k(1) = \int \phi_k(1, \alpha) f_k(\alpha) d\alpha, k= 1, \dots, n \quad (14)$$

Onde $\phi_k(1, \alpha)$, STF ou GTF, são as funções geradoras, α é a coordenada geradora e n é o número de partículas, f_k são as funções pesos que são desconhecidas inicialmente e devem ser estipulada de modo obter a menor energia possível para cada estado, ou seja, serve como parâmetro variacional. As funções ψ_k , são funções monoelétrônicas usadas para construir o determinante de Slater, garantindo que as funções sejam anti-simétricas.^{6,12}

Ao aplicar o teorema do valor médio para essas funções e impondo a condição de $\frac{\partial E}{\partial f(\alpha)} = 0$, obtém-se as equações GW-HF apresentadas abaixo:^{11,12}

$$\int [F(\alpha, \beta) - \varepsilon_k S(\alpha, \beta)] f_k(\beta) d\beta = 0, k= 1, 2, \dots, n \quad (15)$$

Onde ε_k são os autovalor dos orbitais, $F(\alpha, \beta)$ são os núcleos de Fock e $S(\alpha, \beta)$ o recobrimento. As formas completas dos últimos dois termos estão escritos, respectivamente, abaixo:

$$F(\alpha, \beta) = h(\alpha, \beta) + \sum_j^N [2J_j(\alpha, \beta) - K_j(\alpha, \beta)] \quad (16)$$

E

$$S(\alpha, \beta) = \langle \phi_k(1, \alpha) | \phi_k(1, \beta) \rangle \quad (17)$$

O núcleo de Fock é constituído pelos subnúcleos de um elétron, $h(\alpha, \beta)$, e de dois elétrons (integral de Coulomb e troca, nesta ordem), $J_j(\alpha, \beta)$ e $K_j(\alpha, \beta)$, onde as formas explícitas das expressões são apresentadas abaixo, respectivamente:

$$h(\alpha, \beta) = \langle \phi_k(1, \alpha) | h(1) | \phi_k(1, \beta) \rangle \quad (18)$$

$$J_j(\alpha, \beta) = \iint V(\alpha, \xi; \gamma, \beta) f_j^*(\xi) f_j(\gamma) d\xi d\gamma \quad (19)$$

$$K_j(\alpha, \beta) = \iint V(\alpha, \xi; \beta, \gamma) f_j^*(\xi) f_j(\gamma) d\xi d\gamma \quad (20)$$

Quando

$$V(\alpha, \xi; \gamma, \beta) = \left\langle \phi_k(1, \alpha) \phi_j(2, \xi) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \phi_j(2, \xi) \phi_k(1, \alpha) \right\rangle \quad (21)$$

E

$$V(\alpha, \xi; \beta, \gamma) = \left\langle \phi_k(1, \alpha) \phi_j(2, \xi) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \phi_k(2, \xi) \phi_j(1, \alpha) \right\rangle \quad (22)$$

O operador $h(1)$ é responsável por descrever os termos de energia cinética e atração elétron-núcleo, como no método HF.

As equações GW-HF são solucionadas para cada k , por meio de um procedimento iterativo tendo como ponto de partida uma função peso inicial e com um critério arbitrário numérico para a convergência. As soluções dessas equações proporcionam as energias orbitais e novas funções pesos, que é utilizado no processo iterativo para gerar uma nova função peso, este procedimento é realizado até que a convergência seja atingida.

É possível resolver analiticamente as equações GW-HF para o átomo de hidrogênio descrito por funções geradoras do tipo gaussiana. Entretanto, a partir do momento em que se aumenta o número de elétrons as integrais se tornam impraticáveis, havendo a necessidade de usar técnicas de discretização. Neste trabalho, foi utilizada a técnica de discretização integral polinomial.^{10,13}

1.4 Discretização Integral Polinomial e a Troca de Rótulos

A discretização é uma técnica que tem o propósito de transformar um sistema de equações diferenciais em um sistema de equações algébricas mais simples de resolver. O procedimento de Discretização Variacional (DV) os pontos de discretização são avaliados variacionalmente e os valores de α são escolhidos de modo a diminuir a energia total do sistema. Esta técnica, porém, tem um problema, os expoentes (α) são otimizados para obter o melhor orbital 1s, que tem grande importância energética para o sistema, prejudicando os valores médios dos outros orbitais, diferentes de 1s.

Mohallem propôs que as equações GW-HF fossem resolvidas pelo método da Discretização Integral (DI), como alternativa ao método DV. Nesta nova metodologia, são escolhidos N pontos, igualmente espaçados, ao longo de todo o intervalo de integração onde diferentes funções peso são relevantes.¹¹

O método DI possui algumas vantagens como a redução do tempo computacional, por evitar otimizar parâmetros não lineares, descreve adequadamente vários estados excitados em uma única diagonalização, constrói funções de onda de melhor qualidade ao expandir de forma mais eficaz o intervalo de integração, evitando o problema de supervalorização do orbital 1s.^{11,13}

Utilizar apenas o método DI é suficiente quando as funções geradoras são descritas com STF's, por conseguir cobrir significativamente a região do intervalo de integração. Porém, quando as funções geradoras são descritas por GTF's, as funções peso ficam muito espalhadas, tendendo a decair muito lentamente à medida que o expoente aumenta.¹³

Para contornar este problema, Mohallem agregou a troca de rótulos à DI, que consiste em mudar escala no intervalo de integração do espaço da coordenada geradora:¹⁰

$$\Omega = \frac{\ln \alpha}{A}, A > 1 \quad (23)$$

Onde A é um fator determinado empiricamente, sendo o seu melhor valor igual a 6,0. O procedimento de troca de rótulos torna as funções peso estreitas e suaves, possibilitando a utilização da DI nas equações GW-HF usando funções geradoras do tipo GTF.

Para desenvolver a base, a malha de pontos igualmente espaçados é construída para cada simetria w do sistema atômico, conforme a relação descrita abaixo: ¹⁰

$$\Omega_k^{(w)} = \frac{\ln \alpha}{A} = \Omega_{min}^{(w)} + (k - 1)\Delta\Omega^{(w)}, k = 1, \dots, N; w = s, p, d, f \dots \quad 24$$

Sendo que N é o número de ponto da discretização e $\Omega_{min}^{(w)}$ e $\Delta\Omega^{(w)}$ são, respectivamente, o primeiro ponto da malha e o incremento utilizado para obter os próximos pontos.

O tamanho da base esta relacionada ao número de pontos da malha e o menor $\Omega_{min}^{(w)}$ e maior $\Omega_{max}^{(w)}$ pontos da malha são escolhidos de forma que toda a faixa de integração seja contemplada com funções pesos adequadas. A utilização da DI nas equações GW-HF tem como solução um conjunto de $\{\Omega_i\}$ e ainda um conjunto de expoentes $\{\alpha_i\}$.

Por mais que o uso da DI tenha auxiliado na resolução das equações GW-HF utilizando funções GTF para descrever as funções geradoras, o fato de este método gerar pontos igualmente espaçados na malha limita a geração dos expoentes, justamente por não varrer todo o espaço. ^{6,13}

Para solucionar esta restrição da DI, Barbosa e da Silva (2009) propuseram um novo método de discretização escrevendo a equação 24 como uma expansão polinomial, como é apresentada a seguir: ^{6,13}

$$\Omega_k^{(w)} = \frac{\ln \alpha}{A} = \Omega_{min}^{(w)} + \Delta\Omega_1^{(w)}(k - 1) + \Delta\Omega_2^{(w)}(k - 1)^2 + \dots + \Delta\Omega_q^{(w)}(k - 1)^q, \quad \text{sendo } k = 1, 2, \dots, N \text{ e } w = s, p, d, f, \dots \quad (25)$$

Desta forma, os expoentes α das funções de onda GTF's são encontrados da seguinte maneira:

$$\alpha_k^{(w)} = \exp\{6\{\Omega_{min}^{(w)} + \Delta\Omega_1^{(w)}(k - 1) + \Delta\Omega_2^{(w)}(k - 1)^2 + \dots + \Delta\Omega_q^{(w)}(k - 1)^q\} \quad (26)$$

Esse novo método de discretização recebeu o nome de Discretização Integral Polinomial (DIP) e gera conjuntos de bases mais flexíveis, sem perder a qualidade dos resultados. Os incrementos devem ser encontrados de forma variacional e dependem do

grau (q) do polinômio, onde, por meio de testes, foi constatado que o melhor desempenho era obtido quando o polinômio é truncado ao terceiro ou quarto grau.

2 Objetivo

Este trabalho tem como objetivo dar continuidade a outros trabalhos de desenvolvimento de conjunto de base feitos por este grupo no intuito de testar o método da Coordenada Geradora Hartree-Fock polinomial, também elaborado por este grupo de pesquisa. Alguns átomos do primeiro ao quarto período e alguns metais de transição já foram estudados em trabalhos anteriores.

Construir conjuntos de bases, utilizando o p-MCG-HF, para os átomos: Gálio, Germânio, Arsênio, Selênio, Bromo, Criptônio, Rubídio, Estrôncio, Índio, Estanho, Antimônio, Telúrio, Iodo, Xenônio, Césio e Bário.

Objetivos Específicos

- Construir um conjunto de primitivas para os átomos: Gálio, Germânio, Arsênio, Selênio, Bromo, Criptônio, Rubídio, Estrôncio, Índio, Estanho, Antimônio, Telúrio, Iodo, Xenônio, Césio e Bário;
- Comparar a energia do conjunto de primitivas gerados com o valor obtido pelo método HF numérico (NHF);
- Contrair o conjunto de primitivas, utilizando o método da contração geral, para a qualidade 5Z;
- Polarizar os conjuntos contraídos;
- Realizar testes moleculares e comparar com valores de energia encontrados utilizando conjuntos de base já estabelecidos na literatura.

Neste trabalho, foi utilizado o Conjunto de base Universais e o conjunto de base de Partridge, onde os valores de “ Ω ” foram calculados por meio de uma expansão polinomial utilizando o programa ORIGIN-06. Além disso, foi preciso determinar a quantidade de incrementos ($\Delta\Omega$) que seriam utilizados e neste trabalho serão apresentados resultados com malhas de 3 e 4 incrementos.

É importante ressaltar que vários tamanhos de conjuntos de primitiva foram testados sendo selecionados apenas aqueles conjuntos cujo erro das energias estiver na ordem de 10^{-4} , comparado com o valor do NHF⁷.

3.2. Contração

Para realizar a contração, o conjunto ótimo de primitiva para cada átomo foi selecionado e submetido a diversos esquemas de purificação, com o objetivo de diminuir ao máximo o número de expoente do conjunto de primitivas com uma pequena perda na energia do conjunto de base contraído. Para isto, foi utilizando o método de contração geral e o programa CONTRACT²² e as energias das bases contraídas foram obtidas através do programa GAUSSIAN-09²⁰.

3.3. Polarização

Após encontrar o melhor esquema de purificação para cada átomo, é fundamental polarizar o conjunto contraído encontrado para gerar conjuntos de base que descrevem melhor o ambiente molecular.

Para isto, é possível empregar duas metodologias, a primeira otimiza os expoentes escolhidos para os novos orbitais mais externos e a segunda apenas selecionar e repetir alguns dos expoentes do próprio conjunto de base como os expoentes dos novos orbitais externos. Esta última metodologia é chamada de polarização pinçada e vem sendo amplamente usada pelo grupo de pesquisa.

Foram feitos testes com ambas as metodologias, otimizando apenas os melhores resultados obtidos pela polarização pinçada. Os expoentes foram adicionados um a um nos orbitais mais externos, adicionando no máximo 2 expoentes no orbital “f” e 1 expoente no orbital “g”. Após vários testes, foi observado que os melhores expoentes a serem escolhidos para a polarização são aqueles com valores próximos a 1,0000.

Além disso, a polarização foi feita em ambiente atômico para garantir que o conjunto de base gerado fosse o melhor possível em qualquer ambiente molecular.

A polarização otimizada foi realizada utilizando o método pós-Hartree-Fock CISD (Interação de configurações simples e duplas) para que fosse possível incluir nos

cálculos os orbitais de momento angular maior do que aqueles já presentes nos átomos.^{33,}

21

O método CI consiste em fazer combinações linear entre todos os determinantes possíveis (função de onda exata), entretanto isto é impraticável no caso dos átomos selecionados neste trabalho. Então, o procedimento realizado é truncar o método para levar em consideração apenas a excitações simples e duplas.^{33, 34}

Já a polarização pinçada foi realizada utilizando o método DFT (teoria do funcional da densidade) usando o funcional B3LYP, uma vez que esta polarização é realizada em ambiente molecular.

A método DFT baseia-se principalmente em dois teoremas instituídos por Hohenberg-Kohn, o primeiro estabelece que o potencial correspondente ao potencial externo, ou seja, potencial gerado pelos núcleos em um átomo ou molécula isolados é um funcional único de $\rho(r)$, além de uma constante aditiva e o segundo teorema diz que a energia total será sempre maior ou igual a energia exata do sistema, isto é, um método variacional.³³

O funcional B3LYP é um funcional híbrido que mescla resultados exatos com parâmetros ajustáveis. Este funcional depende de três parâmetros empíricos e a energia é descrita de forma a englobar a energias de trocas (LDA + exata obtida por Becker + limite assintótico correto obtido por Becker) e energias de correlações (LDA + valor obtido por Lee, Yang e Parr), onde LDA é a aproximação da densidade local.²⁴

4 Resultados e Discussões

4.1 Geração dos Conjuntos de Primitivas

Sabe-se que os dois fatores mais importantes para gerar um bom conjunto de base é o tamanho escolhido para descrever o átomo e a malha proposta inicialmente. Neste caso, foram feitos dois testes, mudar a quantidade de incrementos na malha (3 ou 4) e ainda utilizar dois conjuntos de base para montar a malha inicial (Conjunto de base universal⁷ e o Conjunto de base não contraído de Partridge).

O conjunto de base universal consiste em um único conjunto de base não contraído usado para descrever todos os átomos da tabela periódica. Esta metodologia era adotada na época na qual os recursos computacionais eram escassos, dificultando o estudo individual dos átomos. É possível imaginar que este tipo de conjunto de base era grande demais para átomos pequenos e muito pequeno para átomos maiores, uma vez que os expoentes eram escolhidos de forma a descrever todos os átomos no geral e não individualmente. Já o Conjunto de base não contraído de Partridge foi construído e otimizado para cada átomo individualmente, gerando um conjunto de base mais preciso.

Na tabela abaixo é possível observar os resultados para a malha com 3 ou 4 incrementos construída a partir do conjunto de base não contraído de Partridge. E foi possível observar que a malha com 4 incrementos, ou seja, um $\Omega_{min}^{(w)}$ e quatro $\Delta\Omega$ apresentou os melhores resultados.

Tabela 1 - Comparação entre malhas de 3 e 4 incrementos (1 Hartree = 27,21eV)

	Energia Calculada		
Gálio	Malha com 3 incrementos	Malha com 4 incrementos	NHF
21s15p13d	1.923,2601	1.923,2602	1.923,2610

Artigos apontam que a quantidade ideal de $\Delta\Omega$ é entre 3 e 4, tendo sido usado até agora pelo grupo apenas malhas de 3 incrementos. Porém, devido ao alto número atômico dos átomos em questão há a necessidade de construir conjuntos de base com uma maior quantidade de expoentes e isso gerando como consequência uma necessidade de ter uma malha maior.

Para definir a quantidade de expoentes que iram formar o conjunto de base é necessário realizar muitos testes, adicionando, ou até mesmo retirando, um expoente de cada vez sempre comparando a energia obtida com a energia do NHF. É importante frisar que ao realizar os cálculos, cada orbital “p” se desdobra em 3 funções (p_x , p_y e p_z) e cada orbital “d” se desdobra em 5 função (d_{xy} , d_{yz} , d_{xz} , $d_{x^2-y^2}$, d_{z^2}) aumentando significativamente o tempo computacional. Além disso, os valores das malhas também foram otimizados até se alcançar a convergência.

Na Tabela 2, estão listados os melhores conjuntos de primitiva formados, juntamente com os valores para comparação.

Tabela 2 - Comparação entre energias de Bases Universal (**preto**) e Partridge (**vermelho**) em Hartree (1 Hartree = 27,21eV) para todos os átomos

Átomo	Tamanho do Conjunto de primitivas	Energia	Energia-NHF	Erro (Energia - NHF)
Ga	28s22p14d	1.923,260926	1.923,261009	0,000083
	22s16p14d	1.923,260715		0,000294
Ge	28s21p13d	2.075,359625	2.075,359733	0,000108
	22s16p14d	2.075,359436		0,000297
As	29s21p14d	2.234,238574	2.234,238654	0,000080
	23s16p11d	2.234,238363		0,000291
Se	29s20p13d	2.399,867493	2.399,867611	0,000118
	22s16p13d	2.399,867199		0,000287
Br	28s14p8d	2.572,440201	2.572,441332	0,001131
	19s13p9d	2.572,441307		0,000025
Kr	29s19p13d	2.752,054786	2.752,054977	0,000191
	22s16p10d	2.752,054595		0,000382
Rb	28s19p13d	2.938,357096	2.938,357453	0,000357
	25s17p13d	2.938,357252		0,000201
Sr	29s19p13d	3.131,545402	3.131,545686	0,000284
	24s16p14d	3.131,545315		0,000371
In	29s21p15d	5.740,168343	5.740,169154	0,000811
	26s18p15d	5.740,168147		0,001007
Sn	29s21p16d	6.022,931022	6.022,931694	0,000672
	25s18p12d	6.022,930643		0,001047
Sb	25s18p12d	6.313,484352	6.313,485319	0,000967
Te	24s17p12d	6.611,782445	6.611,784058	0,001613
I	23s17p13d	6.917,973212	6.917,980895	0,007683
Xe	25s17p11d	7.232,136141	7.232,138363	0,002222
Cs	26s16p12d	7.553,930954	7.553,933658	0,002704
Ba	24s16p12d	7.883,541147	7.883,543827	0,002680

Ao observar a Tabela 2, pode-se prontamente constatar o fato do conjunto de base universal ser construído de forma genérica (para todos os átomos da tabela) teve como

consequência a necessidade de utilizar um número maior de expoente no conjunto de primitivas para obter resultados satisfatório (próximo ao NHF).

Além disso, houve ainda uma consequência mais grave, à medida que o número atômico aumentou e com ele à necessidade de acrescentar mais expoentes, o programa utilizado nesta etapa (ATOM-SCF) não foi capaz de realizar os cálculos, impossibilitando a obtenção de resultados para todos os átomos.

Como os valores de energia obtidos foram semelhantes, o critério para selecionar os conjuntos de primitivas que foram utilizados para a etapa de contração foi o número de expoentes de gerados, pois um menor número de expoente leva a melhor performance computacional, logo, os resultados obtidos através do conjunto de base de Partridge que serão utilizados.

Os valores de expoentes foram adicionados um a um em cada orbital, isso permitiu construir os gráficos abaixo onde é possível ver a diferença de energia ao se adicionar o primeiro expoente em cada um dos orbitais. Nos Gráficos 1 e 2, é possível observar a variação energia do átomo de Gálio e do Estanho ao adicionar um expoente enquanto os outros permanecem constantes. Os resultados para os outros átomos estão descritos no Apêndice A.

Gráfico 1 - Variação da energia em Hartree para o átomo de Gálio ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV)

Gráfico 2 - Variação da energia em Hartree do átomo de Estanho ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV)

Pode-se perceber que, de maneira geral, há uma maior diferença de energia quando se adicionam expoentes no orbital “p” comparando-se com os orbitais “s” e “d”, e este comportamento pode ser esperado para elementos do bloco “p”, por este ser o orbital da camada de valência.

Porém, para os átomos Estanho, Antimônio, Telúrio e Xenônio (também pertencentes ao bloco “p”) o expoente adicionado no orbital “d” foi o que apresentou maior mudança na energia e, além disso, elementos do bloco “s” (Rubídio e o Estrôncio) que pela lógica adotada acima, deveriam apresentar uma maior diferença de energia ao acrescentar expoente no orbital tipo “s”, foi observada que a maior diferença obtida também foi ao adicionar o expoente em “p”.

Os átomos Césio e Bário, apresentam resultados excelentes apenas na adição dos primeiros expoentes no orbital “s”, não gerando outros dados para comparação nesta discussão.

Este comportamento indica que apesar do conhecimento químico prévio ser importante, o trabalho de gerar o melhor conjunto de primitiva deve ser investigado minuciosamente. É importante ressaltar que a energia do conjunto de primitiva tende a convergência, diminuindo, deste modo, o impacto do acréscimo de expoente no conjunto de primitiva. Além disso, ratifica-se que os valores de energias encontrados na Tabela 2 não são as mesmas energias dos Gráficos 1 e 2, pois a Tabela 2 mostra o melhor valor encontrado para cada conjunto de primitiva enquanto os gráficos mostram o processo para alcançar esse valor.

Os valores de Ω_{min} e $\Delta\Omega$ também foram otimizados, substituindo o valor inicial pelo valor encontrado no arquivo de saída. Para alguns casos, houve a necessidade de realizar o procedimento de otimização muitas vezes até que alcançasse a convergência em outros casos a convergência ocorreu mais rapidamente. O Gráfico 3, apresenta um exemplo de cada situação descrita acima.

Gráfico 3 - Diferença entre as energias em Hartree antes (coluna 1) e depois (coluna 2) de otimizar a malha até a convergência (1 Hartree = 27,21eV)

Para o Índio foi necessário repetir o processo de otimização apenas três vezes, já para o Estanho este processo foi repetido 23 vezes. Esta divergência se deve a diferença entre as malhas, onde a malha construída para o Índio deve ser um pouco mais próxima à “malha ideal”, diminuindo a carência por otimizações, fato que pode não ter ocorrido na construção do conjunto de primitivas do Estanho, uma vez que é necessário utilizar conjuntos de base já presentes na literatura para a formar a malha.

Os conjuntos de expoentes gerados são bem-comportados, não havendo discrepâncias entre dois valores consecutivos, sendo possível observar que os valores dos expoentes caem de forma suave. Além disso, os expoentes que descrevem os orbitais mais externos têm a característica se serem difusos, indicando que este conjunto de base não necessitará de um grande número de funções de polarização.

4.2 Contração

Os melhores conjuntos de primitiva para cada átomo foram selecionados para então serem contraídos para a qualidade 5Z.

O esquema de contração indica o quão compactada as primitivas estarão dentro do conjunto de base da qualidade de contração proposta, sendo que quanto mais compacta a função, maior será a perda energética do sistema. Portanto, foi necessário testar diferentes esquemas de purificação para conseguir chegar aos melhores resultados possível, ou seja, a maior contração possível com a menor perda energética. Na tabela abaixo, são apresentadas as melhores contrações obtidas para cada átomo.

Tabela 3 - Esquema de contração e suas energias em Hartree para cada átomo (1 Hartree = 27,21eV)

Qualidade 5 Zeta					
Átomos	Esquemas de Contração	Energia - Contração	Energia - Primitiva	Erro	Tempo (s)
Ga	8s7p5d	1.923,257801	1.923,2606485	0,0028471	2.5
Ge	8s7p5d	2.075,358789	2.075,359436	0,0006471	2.6
As	8s7p5d	2.234,238281	2.234,238363	0,0000829	2.5
Se	8s7p5d	2.399,866636	2.399,867324	0,0006883	2.5
Br	8s7p5d	2.572,438259	2.572,441307	0,0030475	2.3
Kr	8s7p5d	2.752,054549	2.752,054595	0,0000458	2.2
Rb	9s7p5d	2.938,35723	2.938,357252	0,0000215	3.7
Sr	9s7p5d	3.131,545305	3.131,545315	0,0000107	3.0
In	9s8p6d	5.739,8133863	5.740,1681467	0,3547604	4.9
Sn	9s8p6d	6.022,9285852	6.022,9306427	0,0020575	3.7
Sb	9s8p6d	6.313,4799845	6.313,4843519	0,0043674	4.5
Te	9s8p6d	6.611,78183890	6.611,7824453	0,0006064	3.5
I	9s8p6d	6.917,9773965	6.917,9806067	0,0032102	3.7
Xe	9s8p6d	7.232,136116	7.232,1361282	0,0000118	6.4
Cs	9s8p6d	7.553,930946	7.553,9309543	0,0000080	5.6
Ba	9s8p6d	7.883,541137	7.883,5411446	0,0000080	3.7

A escolha errada do esquema de purificação pode desprivilegiar algum expoente que é importante para a descrição de energia fazendo com que pequenas alterações nesse esquema gerem grandes diferenças na energia. No gráfico a seguir é possível observar o grande salto na energia ao contrair um pouco mais o orbital “p”.

Gráfico 4 - Diferença da energia em Hartree entre os esquemas de purificação (1 Hartree = 27,21eV)

Na primeira etapa de geração do conjunto de base, formar o conjunto de primitivas, comparava-se a energia obtida com a energia fornecida por métodos numéricos (NHF). Entretanto, nesta fase do trabalho a comparação é feita com a energia do conjunto da primitiva selecionada, uma vez que um novo limite é estipulado por isso é importante selecionar um bom conjunto de primitiva (com a energia mais próxima ao NHF).

4.3 Polarização

Como já foi discutido anteriormente, apenas contrair não garante que o conjunto de base formado descreverá bem propriedades como ligações químicas e energias de dissociação, por exemplo. Para garantir um bom desempenho do conjunto de base, este deve ser polarizado.

Porém, antes de polarizar, é importante selecionar o melhor conjunto de primitiva e este nem sempre é aquele que oferece a melhor energia. O excesso de otimização da malha pode forçar a convergência, selecionando expoentes ruins.

Na tabela abaixo mostra um exemplo desta constatação, dois arquivos que foram utilizados para fazer a polarização, o primeiro foi o melhor conjunto de primitiva (aquele que teve a melhor energia depois de muitas otimizações) e o segundo possui um valor de energia intermediário entre a malha não otimizada e a malha de menor valor de energia, ambos com o mesmo número de primitivas (22s16p14d).

Tabela 4 - Comparação entre as energias em Hartree entre os dois conjuntos de primitivas e o conjunto de base cc-pv5Z (1 Hartree = 27,21eV)

Gálio-1			Gálio-2			cc-pv5Z	
	Energia	Tempo		Energia	Tempo	Energia	Tempo
Ga-p-2f	2.385,2516	2 min 5.7 s	Ga-p-2f	2.385,2614	1 min 35.1 s	2.385,2614	11 min 57.8 s

Pode-se observar que a energia obtida através da polarização conjunto de primitiva “Gálio-2” foi melhor, uma vez que esta é igual à energia obtida pelo conjunto de base cc-pv5Z, já bem estabelecido na literatura.

A cada otimização da malha de $\Delta\Omega$ gera um novo conjunto de expoente e uma nova energia, abaixo há uma tabela que compara os expoentes do Gálio-1 e Gálio-2.

Tabela 5 - Diferença entre os expoentes de duas otimizações de malhas diferentes

Gálio-1			Gálio-2		
S	P	D	S	P	D
16.221.787,70000000	18.094,75350000	2.605,03881	11.901.073,20000000	23.291,89700000	4.883,61747000
2.465.862,9100000	4.374,00298000	674,766178	1.947.886,44000000	5.196,17209000	1.111,03944000
484.523,8630000	1.340,83412000	223,890242	406.009,74800000	1.499,80712000	338,14108000
118.723,0100000	495,77555900	90,0369493	104.181,46100000	530,65614900	129,19785200
35.078,1023000	211,24143300	41,7363286	31.883,20920000	219,07113500	58,50707700
12.112,5961000	99,52959250	21,3188035	11.298,95490000	100,91021500	29,82378090
4.748,6192400	49,98331090	11,5307325	4.511,87274000	49,82674900	16,35016760
2.058,0975600	25,90260100	6,37866731	1.979,73015000	25,45554660	9,26594101
962,4609370	13,47033910	3,50395581	932,87750100	13,04744130	5,24887039
475,0938170	6,86636772	1,86535999	462,38335000	6,53638308	2,89101890
242,7313340	3,36597504	0,94407162	236,63489700	3,13242457	1,51510637
126,1548950	1,56378592	0,44791075	123,01133300	1,41199143	0,74377121
65,7061909	0,68155185	0,19745649	64,03869800	0,59140465	0,33871557
33,8637491	0,27705989	0,08058181	32,98851790	0,22842685	0,14256884
17,0924180	0,10491193		16,65131640	0,08112288	
8,38176278	0,03711942		8,17321502	0,02653463	
3,97067934			3,88007022		
1,81107556			1,77575437		
0,79452187			0,78265036		
0,33569002			0,33257517		
0,13709151			0,13670839		
0,05443886			0,05466137		

Expoentes mais difusos descrevem melhor as regiões mais afastadas do núcleo, portanto pode-se imaginar que quanto menor o expoente melhor será a polarização. Entretanto, o conjunto de primitiva com expoentes muito pequenos pode descrever mal a região mais interna do orbital, fazendo com que a qualidade do conjunto de primitiva caia, no geral.

Comparando os expoentes dos orbitais “s”, “p” e “d” dos conjuntos de primitivas acima, pode-se constatar que os orbitais “s” e “p” exibem expoentes de valores bem semelhante, já os expoentes que descrevem o orbital “d” apresentam maiores diferenças, como é o possível observar melhor nos gráficos abaixo.

Gráfico 5 - Comparação entre os valores de expoente para cada orbital

Os gráficos acima mostram que a medida que se aumenta o momento angular, os expoentes do conjunto de primitiva “Gálio-1” se tornam cada vez menores fazendo com que a parte mais interna do orbital não seja tão bem descrita e refletindo no valor da energia após a polarização.

Para efeito de comparação, foram utilizados os conjuntos de base já existentes na literatura como o conjunto de base de Pople *et al.* (6-31G* e 6-311G*), Dunning *et al.* (cc-pvQZ e cc-pv5Z) e os pseudopotenciais (LANL2DZ e DEF2-QZVPPD).

Os conjuntos de base de Pople *et al.* foram construídos utilizando a contração do tipo *split valance* onde, neste caso, os orbitais mais internos são representados por 6 funções contraídas. Os orbitais s e p destes conjuntos de base são formados pelos mesmos expoentes do conjunto de primitiva, variando apenas seus coeficientes de contração. Já a camada de valência é composta por 2 expoentes, também iguais àqueles utilizados para descrever os orbitais s e p, de forma que um deles é o resultado da contração de 3 expoentes e o outro é um expoente não contraído. Além disso, é importante frisar que foram utilizadas coordenadas cartesianas para descrever o orbital d e f (exceto para os átomos escândio ao zinco nos quais recomenda-se o uso de harmônicos esféricos).³²

Os conjuntos de base de Dunning *et al.*, por outro lado, foram construídos de forma a agrupar todas as funções que diminuem a energia de correlação atômica para obter o conjunto de base mais contraído possível para uma mesma energia de correlação. Isto é possível devido à utilização de funções de polarização também contraídas, em vez de funções primitivas (não contraídas). Então, para este conjunto de base, são escolhidas uma grande quantidade de expoentes (ex.: (24s16p10d)) que serão totalmente contraídos (ex.: [8s7p1d]) para gerar o conjunto de base inicial e a este conjunto que são adicionadas as funções de polarização contraídas em todos os orbitais (ex.: [8s7p5d3f2g]).²⁸

Pseudopotencial é uma metodologia embasada no fato de que o átomo pode ser segregado em duas regiões uma próxima ao núcleo onde os elétrons são pouco afetados pela presença dos átomos vizinhos e a região de valência, responsável pela ligação entre os átomos. Embora o potencial exercido pelos elétrons mais internos seja fortemente atrativo para os elétrons de valência, é necessário que a função de onda de valência seja ortogonal à função de onda do núcleo resultando em uma alta energia cinética que contribui para obter um potencial de repulsão para a valência. Este formalismo foi baseado no método de ortogonalização de ondas planas, onde as funções de onda de valência são descritas por ondas planas (e não gaussianas).^{29, 30, 31}

A Tabela 6, mostra os testes moleculares com otimização de geometria utilizando os conjuntos de base apresentado acima e o custo computacional exigido para cada molécula.

Tabela 6 - Cálculo de energia em Hartree utilizando conjunto de bases da literatura (1 Hartree = 27,21eV)

	Métodos já existentes na literatura											
Moléculas	6-31G*	Tempo	6-311G*	Tempo	cc-pvQZ	Tempo	cc-pv5Z	Tempo	LANL2DZ	Tempo	DEF2-QZVPPD	Tempo
GaCl	2.383,1893	6.8s	2.385,1623	10.1s	2.385,2540	2 min 49.1 s	2.385,2614	11 min 57.8 s	17,0681	3.3 s	2.290,6890	5 min 52.9 s
GeO	2.150,2021	9.1s	2.152,2569	13.3s	2.152,3570	5 min 37.4 s	2.152,3632	44 min 12.5 s	78,9870	5.0 s	2.095,8032	3 min 30.9 s
AsN	2.288,4446	7.0 s	3.174,1718	19.2s	2.290,6828	5 min 11.5 s	2.290,6884	34 min 2.7 s	60,7952	4.6 s	2259,4806	23.4 s
SeH	2.399,9318	5.0s	2.402,1136	7.4s	2.402,2016	34.5 s	2.402,2058	7 min 46.9 s	9,7855	3.7 s	2.402,1105	59.9 s
HBr	2.572,3013	13.5 s	2.574,7473	18.2 s	2.574,8395	4 min 6.6 s	2.574,8436	50 min 45.1 s	13,7569	7.6 s	2.574,7521	1 min 8.3 s
KrF ₂	2.950,5466	31.1 s	2.953,2885	43.3 s	2.953,4296	11 min 56.6 s	2.953,4407	1 h 3 min 52.1 s	217,6103	13.6 s	2.771,4162	2 min 33.0 s
RbF	-	-	-	-	-	-	-	-	123,7498	3.5s	2.466,0869	4 min 7.7 s
SrF ₂	-	-	-	-	-	-	-	-	230,2468	7.5s	2655,3539	1min 55.4s
InCl	-	-	-	-	-	-	-	-	16,9016	8.8 s	Erro Convergência	-
SnO	-	-	-	-	-	-	-	-	78,5925	11.4 s	4.615,3810	1 h 20 min 28.2 s
SbN	-	-	-	-	-	-	-	-	60,0603	11.3 s	Erro Convergência	-
TeH	-	-	-	-	-	-	-	-	8,6175	4.0 s	2.981,0735	5 min 22.2 s
HI	-	-	-	-	-	-	-	-	11,9766	7.5 s	Erro Convergência	-
XeF ₂	-	-	-	-	-	-	-	-	215,0082	14.1 s	Erro Convergência	-
BaF ₂	-	-	-	-	-	-	-	-	225,0291	6.7s	5.048,0683	2 min 43.7 s
CsF	-	-	-	-	-	-	-	-	119,7604	4.3s	4.899,1252	4 min 8.6 s

Primeira observação a ser feita é que para os conjuntos de base de maior acurácia como os de Pople *et al.* e Dunning *et al.* não há conjuntos de bases disponíveis para todos os átomos estudados neste trabalho, pois o aumento do número de elétrons realmente dificulta a geração de conjunto de base de qualidade com baixo tempo computacional.

Devido ao baixo custo computacional e relativa acurácia, os conjuntos de base desenvolvidos por Pople *et al.* podem ser preferíveis para tratar sistemas com muitos átomos, uma vez que os conjuntos de base de Dunning *et al.* apresentam alto custo computacional.

Ao comparar, de modo geral, o custo computacional e acurácia do conjunto de base, percebe-se que o tempo exigido para concluir o cálculo é aumentado significativamente ao aumentar a qualidade do conjunto de base, como já havia sido mencionado anteriormente. O conjunto de base que ofereceu o menor tempo computacional foi o LANL2DZ, porém a energia obtida por este é inaceitável, já a sua concorrente direta, DEF2-QZVPPD, apresenta energias mais comparáveis aos conjuntos de base de Pople *et al.* e Dunning *et al.* se apresentando como uma boa alternativa para estudo qualitativo de grandes moléculas. O gráfico abaixo mostra com maior clareza a diferença entre o resultado da energia obtida e o tempo (em segundos) necessário para se realizar o cálculo para a molécula de GeO.

Gráfico 6 - Comparação entre o tempo computacional em segundos (laranja) e a energia em Hartree obtida (azul) (1 Hartree = 27,21eV)

Para garantir os melhores resultados possíveis para os conjuntos de base desenvolvidos neste trabalho, foram realizados diversos testes adicionando expoentes em orbitais não populados, neste caso orbitais f e g, a um conjunto de primitiva de alta qualidade obtido. A adição foi feita de forma minuciosa, acrescentando um expoente por vez, testando assim, várias combinações para o acréscimo de 2 expoentes tipo f e 1 tipo g (1f, 1f1g, 2f, 2f1g).

A polarização foi testada em ambiente molecular, adicionando um expoente em um orbital de maior momento angular ao conjunto de base feito até então. Este procedimento foi adotado para que o conjunto de base finalizado cumpra o objetivo de descrever ambientes moleculares satisfatoriamente e não somente ambientes atômicos.

Na Tabela 7 abaixo, é possível observar os melhores expoentes escolhidos, aliando sempre a qualidade do conjunto de base e o tempo computacional, e os melhores resultados obtidos utilizando os conjuntos de base já existentes na literatura (Dunning *et al.* e DEF2-QZVPPD).

Tabela 7- Comparação entre as energias em Hartree obtidas pelo p-MCG-HF e os melhores resultados da literatura e os erros entre os conjuntos de base (1 Hartree = 27,21eV)

Moléculas	Métodos								Erro entre os conjuntos de base da literatura e o p-MCG-HF		
	cc-pvQZ	Tempo	cc-pv5Z	Tempo	DEF2-QZVPPD	Tempo	p-MCG-HF	Tempo	cc-pvQZ-p-MCG-HF	cc-pv5Z-p-MCG-HF	DEF2-QZVPPD-p-MCG-HF
GaCl	2.385,2540	2 min 49.1 s	2.385,2614	11 min 57.8 s	2.290,6890	5 min 52.9 s	2.385,2614	1 min 35.1 s	-0,0074	0,0000	-94,5724
GeO	2.152,3570	5 min 37.4 s	2.152,3632	44 min 12.5 s	2.095,8032	3 min 30.9 s	2.152,3637	14 min 12.2 s	-0,0068	-0,0005	-56,5605
AsN	2.290,6828	5 min 11.5 s	2.290,6884	34 min 2.7 s	2259,4806	23.4 s	2.290,6875	1 min 30.5 s	-0,0047	0,0009	-31,21
SeH	2.402,2016	34.5 s	2.402,2058	7 min 46.9 s	2.402,1105	59.9 s	2.402,2052	15.2 s	-0,0036	0,0006	-0,09
HBr	2.574,8395	4 min 6.6 s	2.574,8436	50 min 45.1 s	2.574,7521	1 min 8.3 s	2.574,8408	49.3 s	-0,0012	0,0029	-0,09
KrF₂	2.953,4296	11 min 56.6 s	2.953,4407	1 h 3 min 52.1 s	2.771,4162	2 min 33.0 s	2.953,4362	5 min 31.0 s	-0,0067	0,0045	-182,02
RbF	-	-	-	-	2.466,0869	4 min 7.7 s	3.040,1174	1 min 10.2 s	-	-	-574,03
SrF₂	-	-	-	-	2655,3539	1min 55.4s	3.333,3484	6 min 35.5 s	-	-	-677,99
InCl	-	-	-	-	Erro Convergência	-	6.203,0036	3 min 45.0 s	-	-	-
SnO	-	-	-	-	4.615,3810	1 h 20 min 28.2 s	6.100,7525	1 min 24.0 s	-	-	-1.485,37
SbN	-	-	-	-	Erro Convergência	-	6.370,7679	1 min 26.8 s	-	-	-
TeH	-	-	-	-	2.981,0735	5 min 22.2 s	6.615,0044	14.7 s	-	-	-3.633,93
HI	-	-	-	-	Erro Convergência	-	6.921,2770	59.7 s	-	-	-
XeF₂	-	-	-	-	Erro Convergência	-	7.434,5046	8 min 45.0 s	-	-	-
BaF₂	-	-	-	-	5.048,0683	2 min 43.7 s	8.086,3367	7 min 49.6 s	-	-	-3.038,27
CsF	-	-	-	-	4.899,1252	4 min 8.6 s	7.656,6492	1 min 5.8 s	-	-	-2.757,52

Em todos os casos onde é possível comparar o conjunto de base gerado utilizando o p-MCG-HF gera energias melhores do que o conjunto de base cc-pvQZ e apresentam resultados muito semelhantes aos obtidos com o conjunto de base cc-pv5Z. Entretanto, o tempo computacional exigido utilizando o p-MCG-HF é menor comparado ao tempo exigido pelo conjunto de base cc-pv5Z e melhor para alguns casos dos outros 2 conjuntos. Essas informações são melhor observadas no gráfico a seguir.

Gráfico 7 - Comparação entre o tempo computacional em segundos e a energia em Hartree obtida por cada um dos melhores conjuntos de base (1 Hartree = 27,21eV)

Para os átomos de Ga-Kr é possível afirmar que o conjunto de base obtido é realmente satisfatório uma vez que comparados com o conjunto de base de Dunning *et al.* apresentou excelentes resultados. Entretanto, para os demais átomos há uma incerteza pois não há na literatura conjuntos de base de alto nível para se comparar, uma vez que os resultados apresentados pelo conjunto de base DEF2-QZVPPD estão bem abaixo dos obtidos pelo conjunto de base gerado neste trabalho.

Um outro modo de avaliar se os conjuntos de base os átomos Rb-Ba são confiáveis é observar se a energia aumenta suavemente a medida que se aumenta o número atômico, é importante lembrar que as energias que estão sendo comparadas são de moléculas diferentes então pequenos erros são compreensíveis. O gráfico abaixo mostra as energias obtidas para cada uma das moléculas.

Gráfico 8 - Comparação entre as energias em Hartree obtidas do conjunto de base p-MCG-HF (1 Hartree = 27,21eV)

Como é possível verificar, para átomos cujo o número atômico aumenta sequencialmente (Ga-Sr e In-Ba) o comportamento do aumento energético é quase linear, indicando que os conjuntos de base dos átomos cuja comparação com a literatura foi inviabilizada devem ser tão confiáveis quanto aqueles comparados com o conjunto de base cc-pv5Z, uma vez que todos os conjuntos de base foram desenvolvidos com a mesma metodologia.

Além disso, outro fator que pode comprovar a confiabilidade deste conjunto de base é a suavidade com a qual a energia varia ao acrescentar as funções de polarização. A tabela abaixo é um dos exemplos deste comportamento, os outros estão no Apêndice B.

Tabela 8 - Alteração da energia em Hartree ao se adicionar as funções de polarização (1 Hartree = 27,21eV)

Polarização	Energia
In-p-0	6.203,0025
In-p-1f	6.203,0031
In-p-2f	6.203,0036
In-p-1f-1g	6.203,0032
In-p-2f-1g	6.203,0036

A Tabela 8 a cima mostra a diferenças entre as energias, na primeira linha encontra-se a energia obtida com o conjunto de base apenas contraído, antes da polarização. A partir deste valor, observa-se que não há aumentos bruscos entre as polarizações, apesar de as funções de polarização influenciarem diferentemente os diferentes orbitais.

O p-MCG-HF, mesmo não utilizando as funções de polarização, costumam fornecer um conjunto de primitiva com expoentes difusos, devido a maior flexibilidade para encontrar os melhores expoentes por cauda do uso do polinômio. Por esta razão, apenas contrair o conjunto de primitivas já permite a obtenção de bons resultados, mesmo antes da polarização, como é possível observar na tabela abaixo.

Tabela 9 - Comparação entre as energias em Hartree obtidas dos conjuntos de base antes e depois da polarização (1 Hartree = 27,21eV)

Moléculas	Energia antes da polarização	Tempo antes da polarização	Energia melhor polarização	Tempo melhor polarização	Erro
GaCl	2.385,2607	1 min 7.4 s	2.385,2614	1 min 35.1 s	0,0006
GeO	2.152,3616	6 min 41.4 s	2.152,3637	14 min 12.2 s	0,0022
AsN	2.290,6858	42.6 s	2.290,6875	1 min 30.5 s	0,0016
SeH	2.402,2047	9.4 s	2.402,2052	15.2 s	0,0005
HBr	2.574,8384	39.1 s	2.574,8408	49.3 s	0,0023
KrF₂	2.953,4306	4 min 51.9 s	2.953,4362	5 min 31.0 s	0,0057
RbF	3.037,8781	59.5 s	3.040,1174	1 min 10.2 s	2,2393
SrF₂	3.333,3425	6 min 51.6 s	3.333,3484	6 min 35.5 s	0,0059
InCl	6.203,0025	2 min 49.8 s	6.203,0036	3 min 45.0 s	0,0010
SnO	6.100,7482	57.5 s	6.100,7525	1 min 24.0 s	0,0043
SbN	6.370,7644	1 min 2.9 s	6.370,7679	1 min 26.8 s	0,0035
TeH	6.615,0029	17.2 s	6.615,0044	14.7 s	0,0015
HI	6.921,2754	41.0 s	6.921,2770	59.7 s	0,0016
XeF₂	7.434,4930	6 min 40.8 s	7.434,5046	8 min 45.0 s	0,0116
CsF	7.656,6467	48.5 s	7.656,6492	7 min 49.6 s	0,0025
BaF₂	8.086,3254	5 min 40.7 s	8.086,3367	1 min 5.8 s	0,0113

Mesmo obtendo bons resultados para a maior parte dos átomos, a polarização é indispensável para melhorar o conjunto de base, tornando-o mais robusto.

A polarização pode ser feita de duas maneiras, utilizando expoentes difusos do próprio conjunto de base (polarização pinçada) ou ainda otimizar este expoente. Na tabela abaixo, mostra a diferença entre a energia molecular obtida e o tempo computacional gasto.

Tabela 10 - Comparação entre as energias em Hartree obtidas por ambas polarizações (1 Hartree = 27,21eV)

Ga-p-2f	Ga-o-2f	Ge-p-2f	Ge-o-2f	As-p-2f	As-o-2f
2.385,2614	2.385,2614	2.152,3637	2.152,3637	2.290,6875	2.290,6873
1 min 35.1 s	1 min 35.3 s	14 min 12.2 s	20 min 3.6 s	1 min 30.5 s	38.1 s
Se-p-2f	Se-o-2f	Br-p-2f	Br-o-2f	Kr-p-2f	Kr-o-2f
2.402,2052	2.402,2056	2.574,8408	2.574,8407	2.953,4362	2.953,4366
15.2 s	24.4 s	49.3 s	1 min 8.7 s	5 min 31.0 s	8 min 37.3 s
Rb-p-2f	Rb-o-2f	Sr-p-2f	Sr-o-2f	In-p-2f	In-o-2f
3.037,8790	3.040,1174	3.333,3470	3.333,3484	6.203,0036	6.203,0032
1 min 12.4 s	1 min 10.2 s	10 min 20.9 s	6 min 35.5 s	3 min 45.0 s	6 min 14.6 s
Sn-p-2f	Sn-o-2f	Sb-p-2f	Sb-o-2f	Te-p-2f	Te-o-2f
6.100,7525	6.100,7525	6.370,7679	6.370,7678	6.615,0044	6.615,0048
1 min 24.0 s	2 min 1.5 s	1 min 26.8 s	2 min 1.2 s	14.7 s	36.7 s
I-p-2f	I-o-2f	Xe-p-2f	Xe-o-2f	Cs-p-2f	Cs-o-2f
6.921,2770	6.921,2768	7.434,5036	7.434,5046	7.656,6492	7.656,6496
59.7 s	56.7 s	8 min 34.3 s	8 min 45.0 s	1 min 5.8 s	1 min 35.9 s
		Ba-p-2f	Ba-o-2f		
		8.086,3367	8.086,3394		
		7 min 49.6 s	8 min 33.2 s		

Para muitos casos, a otimização dos expoentes não trouxe melhoras significativas para a energia, porém o tempo computacional aumenta bastante. Entretanto, para alguns casos, como o Rubídio e o Estrôncio, há uma melhora tanto do tempo computacional quanto da energia. Na tabela abaixo, estão os valores dos expoentes da polarização pinçada e a otimizada.

Tabela 11 - Comparação entre os expoentes obtidos pela polarização pinçada e otimizada

Rubídio	
Pinçada	Otimizada
F 1 1.00	F 1 1.00
1,37635620	1,10638055
F 1 1.00	F 1 1.00
0,65004151	0,500032846

Expoentes mais difusos tendem a diminuir a energia e o processo de otimização costuma de fato gerar menores valores de expoente. Entretanto, escolher expoentes de dentro do próprio conjunto de base para serem as funções de polarização diminuem o

tempo computacional. Desta forma, a polarização pinçada é preferida à otimizada para a maioria dos casos.

É importante ressaltar que todos os testes moleculares foram realizados utilizando conjuntos de base com a mesma metodologia para ambos os átomos, isso faz com que haja um cancelamento de erros existentes em uma dada metodologia, fazendo com que o resultado seja melhor.

Na tabela abaixo mostra um pequeno teste realizado no intuito de mostrar que mesclar dois conjuntos de base (utilizando o conjunto de base construído utilizando o p-MCG-HF para os átomos estudados neste trabalho) com metodologias distintas pode gerar novos resultados.

Tabela 12 - Comparação entre as energias em Hartree geradas por diferentes metodologias (1 Hartree = 27,21eV)

Moléculas	Energia (p-MCG- HF-cc-pv5Z)	Tempo	Energia (p-MCG- HF-p-MCG HF)	Tempo	Energia (cc-pv5Z- cc-pv5Z)	Tempo
GaCl	2.385,2608	3 min 56.3 s	2.385,2614	1 min 35.1 s	2.385,2614	11 min 57.8 s
GeO	2.152,3640	44 min 57.9 s	2.152,3637	14 min 12.2 s	2.152,3632	44 min 12.5 s
AsN	2.290,6884	9 min 35.1 s	2.290,6875	1 min 30.5 s	2.290,6884	34 min 2.7 s
SeH	2.402,2055	2 min 42.7 s	2.402,2052	15.2 s	2.402,2058	7 min 46.9 s
KrF2	2.953,4412	37 min 3.0 s	2.953,4362	5 min 31.0 s	2.953,4407	1 h 3 min 52.1 s

De modo geral, não há grandes alterações nos valores de energia, fazendo com que não haja a necessidade de descartar a possibilidade de mesclar desses dois conjuntos de base, caso seja necessário. Porém, é certo que o tempo computacional requerido diminui drasticamente para grande parte das as moléculas estudadas, fazendo com que seja mais vantajoso mesclar os conjuntos de base do que realizar cálculos apenas com os conjuntos de base da metodologia cc-pv5Z.

5 Conclusão

O p-MCG-HF se mostrou, mais uma vez, um poderoso método para desenvolver excelentes conjuntos de primitivas, mesmo para átomos com altos valores de número atômico (Z), ou seja, os átomos não usualmente estudados, devido ao grande número de elétrons envolvidos.

O melhor conjunto de primitiva para cada átomo foi contraído para a qualidade 5Z com êxito, havendo pouca perda energética neste processo, utilizando o método da contração geral.

Os conjuntos de base, já contraídos, foram polarizados em ambiente molecular utilizando duas técnicas distintas, polarização pinçada e a otimizada.

Após vários testes, comparando a energia derivada das polarizações com aquelas obtidas utilizando conjuntos de base já existentes na literatura, constata-se que os conjuntos de base desenvolvidos neste trabalho está à altura daqueles mais comumente utilizados (conjunto de base de Pople *et al.* e o de Dunning *et al.*), tendo ainda como uma grande vantagem de um menor tempo computacional quando comparado aos outros conjuntos de base presentes na literatura, basta ver o tempo computacional necessário para concluir os cálculos das moléculas selecionadas, utilizando o conjunto de base desenvolvido neste trabalho.

Entre os métodos de polarização, tanto a polarização pinçada quanto a otimizada levam as energias semelhantes, porém o tempo de cálculo é menor quando se realiza a polarização pinçada, para a maioria dos casos.

Portanto, pode-se afirmar que utilizar p-MCG-HF para construir conjunto de base leva a resultados de alta qualidade com baixo custo computacional, sendo preferível àqueles conjuntos de base já existentes na literatura. Inclusive, o prognóstico é que seja melhor misturar o conjunto de base derivado do p-MCG-HF com outro conjunto de base de alta qualidade (ex.: cc-pv5Z) do que utilizar apenas o conjunto da literatura para realizar estudos teóricos.

6 Referência

- 1 LEVINE, N. **Quantum chemistry**. 5. ed. Upper Saddle River, New Jersey: Prentice Hall do Brasil, 2000. 739 p.
- 2 MCQUARRIE, A. **Quantum chemistry**. 2. ed. Mill Valley, California: University Science Books, 2008. 690 p.
- 3 PAULING, L.; WILSON, B. **Introduction to quantum mechanics**: with applications to chemistry. New York: Mcgraw-Hill Book Company, 1935. 463 p.
- 4 EISBERG, M. **Fundamental of modern physics**. 3. ed. New York: Joh Wiley e Sons, 1963. 729 p.
- 5 JENSEN, F. Unifying general and segmented contracted basis sets. segmented polarization consistent basis sets. **Journal of Chemical Theory and Computution**, v. 10, p. 1074-1085, 2014.
- 6 CELESTE, R.; MARINGOLO, M. P.; COMAR JÚNIOR, M.; VIANA, R. B.; GUIMARÃES, A. R.; HAIDUKE, R. L. A.; DA SILVA, A. B. F. Accurate Gaussian basis sets for atomic and molecular calculations obtained from the generator coordinate method with polynomial discretization. **Jounal of Molecular Modeling**, v. 21, p. 1-7, 2015.
- 7 DE CASTRO, E. V. R.; JORGE, F. E. Accurate universal Gaussian basis set for all atoms of the periodic table. **The Journal of Chemical Physics**, v. 108, p. 5225, 1998.
- 8 DE CASTRO, E. V. R.; JORGE, F. E.; PINHEIRO, J.C. Accurate Gaussian basis sets for second-row atoms and ions generated with the improved generator coordinate Hartree–Fock method. **Chemical Physics**, v. 243, p. 1–7, 1999.
- 9 ROOTHAN, C. C. J. New developments in molecular orbital theory. **Reviews of Modern Physics**, v. 23, p. 69-89, 1951.
- 10 MOHALLEM, R. J. A Futher study on the discretisation of the Griffin-Hill-Weeler equation. **Zeitschrift fur Physikalishe D: Atoms, Molecules and Clusters**, p. 339-344, 1986.

- 11 MOHALLEM, R. J. A Griffin-Hill-Wheeler version of the Hartree-Fock equations. **International Journal of Quantum Chemistry: Quantum Chemistry Symposium**, p. 45-55, 1986.
- 12 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.
- 13 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.
- 14 JORGE, F. E.; DE CASTRO, E. V. R. Improved generator coordinate Hartree-Fock method, application to first-row atoms. **Chemical Physics Letters**, v. 302, p. 454-460, 1999.
- 15 WHEELER J. A.; GRIFFING J. J. Collective motions in nuclei by the method of generator coordinates. **Physical Review Letters**, v. 108, p. 311-327, 1957.
- 16 CAMPOS, T. C. **Conjuntos de bases gaussianas: aplicações em cálculos de constantes espectroscópicas e rotação ótica**. 2012. 111 f. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2012.
- 17 RAFFENETTI, R. C. General contraction of gaussian atomic orbitals: core, valence, polarization, and diffuse basis sets; molecular integral evaluation. **The Journal of Chemical Physics**, v. 58, p. 4452, 1973.
- 18 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. 136 f. Tese (Doutorado em Física) - Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 1990.
- 19 MOHALLEM, J. R.; TRSIC, M. A case of analytical solution of the Griffin-Hill-Wheeler equation: the ground state of the Hydrogen atom with a Gaussian generator function. **Zeitschrift Fur Physik**, v. 322, p. 535-537, 1985.
- 20 GAUSSIAN, Version 09. Wallingford: Gaussian, 2009.

- 21 SZABO, A.; OSTLUND, S. N. **Modern quantum chemistry**: introduction to advanced electronic structure theory. Mineola: Dover Publications, 1996. 466 p.
- 22 ORIGIN, Version 06. Northampton: OriginLab, 1991.
- 23 PARTRIDGE, H. Near Hartree-Fock quality GTO basis sets for the first and third row atoms. **The Journal of Chemical Physics**, v. 90, p. 1043, 1989.
- 24 PEDROZA, A. C. Teoria do funcional da densidade: Uma possível Solução para o problema de muitos elétrons da mecânica quântica. **Physicae Organum**, v. 2, n. 1, p. 1-14, 2016.
- 25 MALL, G.; FROESE, C. Nuclear magnetic shielding constants calculated from numerical Hartree Fock wave functions. **International Journal of Quantum Chemistry**, v. 1, p. 95-98, 1967.
- 26 LAAKSONEN, L.; PYYKK, P.; SUNDHOLM, D. Fully numerical Hartree-Fock methods for molecules. **Computer Physics Reports**, n. 4, p. 313-344, 1986.
- 27 FROESE, C. Numerical solution of the Hartree-Fock equations. **Canarlian Journal of Physics**, v. 41, p. 1895-1910, 1963.
- 28 WILSON, A. K.; WOON, D. E.; PETERSON, K. A.; DUNNING JUNIOR, T. H. Gaussian basis sets for use in correlates molecular calculations. The atoms Gallium through Krypton. **The Jounal of Chemical Physics**, v. 110, p. 7667, 1999.
- 29 HAY, P. J.; WADT, W. R.; Ab initio effective core potentials for molecular calculation: Potentials for the transition metal atoms Sc to Hg. **The Journal of Chemical Physics**. v. 82, p. 270,1985.
- 30 PICKETT, W. E.. Pseudopotential methods in condensed matter applications. **Computer Physics**, v. 9, p. 118, 1989.
- 31 RAPPOPORTA , D.; FURCHE, F. Property-optimized Gaussian basis sets for molecular response calculations. **The Journal of Chemical Physics**, v. 133, p. 134105, 2010.

32 RASSOLOV, V. A.; RATNER, M. A.; POPLE, J. A.; REDFERN, P. C.; CURTISS, L. A. 6-31G* basis set for third row atoms. **Journal of Computational Chemistry**, v. 22, n. 9, p. 976-984, 2001.

33 MORGON, H.; COUTINHO, K. **Métodos de química teórica e modelagem molecular**, São Paulo: Livraria da Física, 2007. 539 p.

APÊNDICE A

Os gráficos abaixo mostram evolução da energia à medida que se acrescentam expoentes em cada um dos orbitais.

Gráfico 9 - Variação da energia em Hartree do átomo de Germânio ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV)

Gráfico 10 - Variação da energia em Hartree do átomo de Arsênio ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV)

Gráfico 11-Variação da energia em Hartree do átomo de Selênio ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV)

Gráfico 12 - Variação da energia em Hartree do átomo de Bromo ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV)

Gráfico 13 - Variação da energia em Hartree do átomo de Criptônio ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV)

Gráfico 14 - Variação da energia em Hartree do átomo de Estrôncio ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV)

Gráfico 15 - Variação da energia em Hartree do átomo de Rubídio ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV)

Gráfico 16 - Variação da energia em Hartree do átomo de Índio ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV)

Gráfico 17 - Variação da energia em Hartree do átomo de Estanho ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV)

Gráfico 18 - Variação da energia em Hartree do átomo de Antimônio ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV)

Gráfico 19 - Variação da energia em Hartree do átomo de Telúrio ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV)

Gráfico 20 - Variação da energia em Hartree do átomo de Iodo ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV)

Gráfico 21 - Variação da energia em Hartree do átomo de Xenônio ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV)

Gráfico 22 - Variação da energia em Hartree do átomo de Césio ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV)

Gráfico 23 - Variação da energia em Hartree do átomo de Bário ao se adicionar o primeiro expoente em cada orbital (1 Hartree = 27,21eV)

APÊNDICE B

Na tabela mostra a evolução da energia à medida que são feitas as polarizações.

Tabela 13 - Alteração da energia em Hartree ao se adicionar as funções de polarização e o tempo computacional (1 Hartree = 27,21eV)

Gálio			Germânio		
	Energia	Tempo		Energia	Tempo
Ga-0	2.385,26073	1 min 7.4 s	Ge-0	2.152,3616	6 min 41.4 s
Ga-p-1f	2.385,26123	1 min 18.1 s	Ge-p-1f	2.152,3634	9 min 12.0 s
Ga-p-2f	2.385,26136	1 min 35.1 s	Ge-p-2f	2.152,3637	14 min 12.2 s
Ga-p-1f-1g	2.385,26128	1 min 57.7 s	Ge-p-1f-1g	2.152,6349	15 min 41.8 s
Ga-p-2f-1g	2.385,26137	2 min 22.5 s	Ge-p-2f-1g	2.152,3637	24 min 36.8 s
Arsênio			Selênio		
	Energia	Tempo		Energia	Tempo
As-0	2.290,6858	42.6 s	Se-0	2.402,2047	9.4 s
As-p-1f	2.290,6873	52.1 s	Se-p-1f	2.402,2051	12.8 s
As-p-2f	2.290,6874	58.5 s	Se-p-2f	2.402,2052	15.2 s
As-p-1f-1g	2.290,6869	46.8 s	Se-p-1f-1g	2.402,2051	21.2 s
As-p-2f-1g	2.290,6875	1 min 37.8 s	Se-p-2f-1g	2.402,2052	24.6 s
Bromo			Criptônio		
	Energia	Tempo		Energia	Tempo
Br-0	2.574,8399	29.4 s	Kr-0	2.953,4306	4 min 51.9 s
Br-p-1f	2.574,8405	41.4 s	Kr-p-1f	2.953,4361	5 min 44.0 s
Br-p-2f	2.574,8408	49.3 s	Kr-p-2f	2.953,4362	5 min 31.0 s
Br-p-1f-1g	2.574,8406	1 min 14.7 s	Kr-p-1f-1g	2.953,4338	9 min 2.5 s
Br-p-2f-1g	2.574,8408	1 min 25.0 s	Kr-p-2f-1g	2.953,4372	12 min 12.3 s
Rubídio			Estrôncio		
	Energia	Tempo		Energia	Tempo
Rb-0	3.037,8781	59.5 s	Sr-0	3.333,3425	6 min 51.6 s
Rb-p-1f	3.037,8784	49.5 s	Sr-p-1f	3.333,3434	8 min 30.1 s
Rb-p-2f	3.037,8790	1 min 12.4 s	Sr-p-2f	3.333,3470	10 min 20.9 s
Rb-p-1f-1g	3.037,8785	1 min 56.6 s	Sr-p-1f-1g	3.333,3437	15 min 35.9 s
Rb-p-2f-1g	3.037,8792	1 min 42.7 s	Sr-p-2f-1g	3.333,3470	10 min 20.9 s
Índio			Estanho		
	Energia	Tempo		Energia	Tempo
In-0	6.203,0025	2 min 49.8 s	Sn-0	6.100,7482	57.5 s
In-p-1f	6.203,0031	3 min 19.2 s	Sn-p-1f	6.100,7504	1 min 10.2 s
In-p-2f	6.203,0036	3 min 45.0 s	Sn-p-2f	6.100,7525	1 min 24.0 s
In-p-1f-1g	6.203,0032	4 min 32.8 s	Sn-p-1f-1g	6.100,7508	1 min 44.5 s
In-p-2f-1g	6.203,0036	5 min 10.4 s	Sn-p-2f-1g	6.100,7525	5 min 17.3 s

Antimônio			Telúrio		
	Energia	Tempo		Energia	Tempo
Sb-0	6.370,7644	1 min 2.9 s	Te-0	6.615,0029	17.2 s
Sb-p-1f	6.370,7665	1 min 15.0 s	Te-p-1f	6.615,0036	12.9 s
Sb-p-2f	6.370,7679	1 min 26.8 s	Te-p-2f	6.615,0044	14.7 s
Sb-p-1f-1g	6.370,7666	1 min 46.2 s	Te-p-1f-1g	6.615,0038	21.3 s
Sb-p-2f-1g	6.370,7679	6 min 42.0 s	Te-p-2f-1g	6.615,0044	23.3 s
Iodo			Xenônio		
	Energia	Tempo		Energia	Tempo
I-0	6.921,2754	41.0 s	Xe-0	7.434,4930	6 min 40.8 s
I-p-1f	6.921,2766	50.3 s	Xe-p-1f	7.434,4969	9 min 20.1 s
I-p-2f	6.921,2770	59.7 s	Xe-p-2f	7.434,5036	8 min 34.3 s
I-p-1f-1g	6.921,2766	1 min 19.5 s	Xe-p-1f-1g	7.434,4986	12 min 14.6 s
I-p-2f-1g	6.921,2771	1 min 41.1 s	Xe-p-2f-1g	7.434,5040	15 min 55.6 s
Césio			Bário		
	Energia	Tempo		Energia	Tempo
Cs-0	7.656,6467	48.5 s	Ba-0	8.086,3254	5 min 40.7 s
Cs-p-1f	7.656,6475	1 min 0.1 s	Ba-p-1f	8.086,3287	6 min 46.8 s
Cs-p-2f	7.656,6492	1 min 5.8 s	Ba-p-2f	8.086,3367	7 min 49.6 s
Cs-p-1f-1g	7.656,6477	1 min 23.3 s	Ba-p-1f-1g	8.086,3293	10 min 36.4 s
Cs-p-2f-1g	7.656,6495	4 min 20.8 s	Ba-p-2f-1g	8.086,3384	12 min 4.6 s

APÊNDICE C

Conjunto de base para os átomos Ga, Ge, As, Se, Br, Kr, Rb, Sr, In, Sn, Sb, Te, I, Xe, Cs e Ba.

Ga	0.2366349E+03 -0.1520138E-01	s 1 1.0
Ga 0		0.05466137 1.0
s 15 1.0	0.1230113E+03 -0.5864165E-01	p 10 1.0
0.1190107E+08 0.3550039E-05	0	0.2329190E+05 0.4968924E-04
0.1947886E+07 0.2692025E-04	0.8204916E+00	0.5196172E+04 0.5361650E-03
0.4060097E+06 0.1674415E-03	0.1665132E+02 0.4891470E+01	0.1499807E+04 0.3796072E-02
0.1041815E+06 0.7937071E-03	0.8173215E+01	0.5306561E+03 0.1790236E-01
0.3188321E+05 0.3029076E-02	0.4683632E+01.6403870E+02 -0.1223930E+00	0.2190711E+03 0.6016269E-01
0.1129895E+05 0.9611562E-02	0.3298852E+02	0.1009102E+03 0.1498157E+00
0.4511873E+04 0.2609443E-01	0.3880070E+01 -	0.4982675E+02 0.2745553E+00
0.1979730E+04 0.6161887E-01	0.1076830E+02	0.2545555E+02 0.3555328E+00
0.9328775E+03 0.1265376E+00	s 8 1.0	0.1304744E+02 0.2539667E+00
0.4623834E+03 0.2201662E+00	0.2366349E+03 0.7062083E-04	0.6536383E+01 0.6512950E-01
0.2366349E+03 0.3005462E+00	0.1230113E+03 0.2719691E-03	p 5 1.0
0.1230113E+03 0.2706664E+00	0.6403870E+02 0.5941830E-03	0.4982675E+02 -0.4804736E-02
0.6403870E+02 0.1160329E+00	0.3298852E+02 -0.3942407E-02	0.2545555E+02 -0.2779850E-01
0.3298852E+02 0.1326963E-01	0.3298852E+02 -0.3942407E-02	0.1304744E+02 0.4276795E-01
0.1665132E+02 0.1305132E-02	0.1665132E+02 -0.2340251E-01	0.6536383E+01 0.2951225E+00
s 8 1.0	0.8173215E+01 -0.2252790E-01	0.3132425E+01 0.5918430E+00
0.9328775E+03 0.2548384E-02	0.3880070E+01 0.5142254E-01	p 5 1.0
0.4623834E+03 0.1317153E-01	0.1775754E+01 -0.3476334E-02	0.2545555E+02 -
0.2366349E+03 0.4404082E-01	0.1775754E+01 -0.3476334E-02	0.3911275E-03
0.1230113E+03 0.8653078E-01	0.3298852E+02 -.2775261E+00	0.1304744E+02 0.5068591E-03
0.6403870E+02 0.3775693E-01	s 1 1.0	0.6536383E+01 0.1715859E-02
0.3298852E+02 -.2775261E+00	s 1 1.0	0.3132425E+01 0.3558201E-02
0.1665132E+02 -.5974489E+00	0.78265036 1.0	
0.8173215E+01 -.3107078E+00	s 1 1.0	
s 8 1.0	0.33257517 1.0	
0.4623834E+03 -0.3094593E-03	s 1 1.0	
	0.13670839 1.0	

0.1411991E+01 -		1111.03944000	0.00007224	d 1 1.0
0.1319489E-01				
		338.14108000	0.00075986	0.74377121 1.0
p 1 1.0		129.19785200	0.00456092	d 1 1.0
0.59140465 1.0				
		58.50707700	0.01691379	0.33871557 1.0
p 1 1.0				
		29.82378090	0.04330212	d 1 1.0
0.22842685 1.0				
		16.35016760	0.08999489	0.14256884 1.0
p 1 1.0				
		9.26594101	0.15639138	f 1 1.0
0.08112288 1.0				
		5.24887039	0.22423297	0.74377121 1.0
p 1 1.0				
		2.89101890	0.26919358	f 1 1.0
0.02653463 1.0				
		d 1 1.0		0.33871557 1.0
d 10 1.0				
		1.51510637	1.0	****
4883.61747000	0.00000335			
Ge		0.8346840E+02		0.8346840E+02 -
		0.1690176E+00		0.7998790E-02
Ge O				
		0.4277733E+02	0.3055520E-01	0.4277733E+02
s 15 1.0		01		0.1802695E-01
0.2129248E+08	0.1919994E-05	0.2145511E+02	0.8806486E-03	0.2145511E+02
				0.1315576E+00
0.3197332E+07	0.1643993E-04	s 8 1.0		0.1045232E+02
				0.2492791E+00
0.6236660E+06	0.1101695E-03	0.1235510E+04 -		
		0.1605726E-02		0.4921241E+01 -
				0.2896814E+00
0.1522504E+06	0.5534377E-03	0.6094394E+03 -		
		0.9096735E-02		s 6 1.0
0.4492840E+05	0.2199951E-02	0.3107653E+03 -		0.8346840E+02 0.6660125E-03
		0.3241966E-01		
0.1551776E+05	0.7189915E-02	0.1609873E+03 -		0.4277733E+02 -
		0.7803902E-01		0.1312417E-02
0.6089019E+04	0.1997624E-01	0.8346840E+02 -		0.2145511E+02 0.7511171E-03
		0.7537017E-01		
0.2641283E+04	0.4829900E-01	0.4277733E+02		0.1045232E+02 -
		0.1625656E+00		0.2503703E-02
0.1235510E+04		0.2145511E+02		0.4921241E+01 -
0.1024166E+00		0.5906572E+00		0.3689983E-02
0.6094394E+03		0.1045232E+02		0.2233601E+01 -
0.1878178E+00		0.4596708E+00		0.9421035E-01
		s 7 1.0		s 1 1.0
0.3107653E+03				
0.2810866E+00		0.3107653E+03 -		0.97717035 1.0
		0.1538461E-02		
0.1609873E+03				s 1 1.0
0.2988023E+00		0.1609873E+03 -		
		0.1463193E-02		0.41305552 1.0

s 1 1.0		0.3200073E+02 -	1694.98302000 0.00003689
0.16952534 1.0		0.1586228E-01	485.27558200 0.00045053
s 1 1.0		0.1641095E+02 0.5685982E-02	178.05108000 0.00300379
0.06805163 1.0		0.8288975E+01 0.1221449E+00	78.74573240 0.01221174
p 10 1.0			39.73552170 0.03331310
0.2634427E+05 0.4372202E-04		0.4051614E+01 0.3167034E+00	21.79182600 0.07185697
0.6187588E+04 0.4310167E-03		p 4 1.0	12.45129600 0.13251217
0.1846718E+04 0.2921653E-02		0.1641095E+02 0.8265523E-04	7.15048059 0.20455831
0.6658650E+03 0.1366853E-01		0.8288975E+01 -	4.00681459 0.26454283
0.2770664E+03 0.4693947E-01		0.3727131E-02	d 1 1.0
0.1276859E+03 0.1232655E+00		0.4051614E+01 -	2.14042635 1.0
		0.7989869E-02	d 1 1.0
		0.1892019E+01 -	1.07172198 1.0
		0.2612231E-01	d 1 1.0
0.6284290E+02 0.2436692E+00		p 1 1.0	0.49766679 1.0
0.3200073E+02 0.3497275E+00		0.83723440 1.0	d 1 1.0
0.1641095E+02 0.2957092E+00		p 1 1.0	0.21340953 1.0
0.8288975E+01 0.9841856E-01		0.34985634 1.0	f 1 1.0
p 5 1.0		p 1 1.0	1.07172198 1.0
0.6284290E+02 -		0.13822745 1.0	f 1 1.0
0.2712638E-02		p 1 1.0	0.49766679 1.0
As		0.05194514 1.0	****
As 0		d 9 1.0	
s 16 1.0			
0.3161625E+08 0.1260001E-05		0.2423439E+05 0.4418530E-02	0.1577980E+03 0.2731035E+00
0.4805971E+07 0.1059999E-04		0.9640947E+04 0.1211083E-01	0.8476707E+02 0.1487802E+00
0.9464795E+06 0.7026998E-04		0.4255708E+04 0.2900626E-01	0.4475522E+02 0.2723441E-01
0.2330577E+06 0.3490199E-03		0.2034683E+04 0.6188468E-01	0.2303468E+02 0.9800401E-03
0.6940490E+05 0.1370770E-02		0.1030840E+04 0.1179856E+00	s 11 1.0
		0.5426780E+03 0.1977447E+00	0.9640947E+04 -
		0.2917589E+03 0.2738353E+00	0.3013209E-04
			0.4255708E+04 -
			0.2120734E-03

0.2034683E+04 - 0.1077070E-02	0.1577980E+03 01	0.1082513E- 01	0.8652139E+01 01	0.8897420E-
0.1030840E+04 - 0.4225954E-02	0.8476707E+02 01	0.1419652E-	p 5 1.0	
0.5426780E+03 - 0.1435917E-01	0.4475522E+02 - 0.4559313E-01		0.6234335E+02 02	-0.2612531E-
0.2917589E+03 - 0.3968474E-01	0.2303468E+02 - 0.6107965E+00		0.3232901E+02 01	-0.1616434E-
0.1577980E+03 - 0.8055337E-01	0.1148848E+02 - 0.1019195E+01		0.1685520E+02 01	0.1249517E-
0.8476707E+02 - 0.6583218E-01	0.5532160E+01 0.1185928E+01		0.8652139E+01 0.1322148E+00	
0.4475522E+02 0.1650964E+00	0.2568481E+01 0.3219076E+01		0.4301459E+01 0.3209753E+00	
0.2303468E+02 0.5670526E+00	s 1 1.0		p 4 1.0	
0.1148848E+02 0.4652071E+00	1.15078718 1.0		0.1685520E+02 04	0.6006857E-
s 10 1.0	s 1 1.0		0.8652139E+01 - 0.5029535E-02	
0.2034683E+04 0.6934518E- 05	0.49914508 1.0		0.4301459E+01 - 0.1041646E-01	
0.1030840E+04 0.5787193E- 05	s 1 1.0		0.2046499E+01 - 0.3377915E-01	
0.5426780E+03 0.6312711E- 04	0.21073518 1.0		p 1 1.0	
0.2917589E+03 0.7049508E- 04	s 1 1.0		0.92481983 1.0	
0.1577980E+03 0.2356364E- 03	0.08727304 1.0		p 10 1.0	
0.8476707E+02 - 0.3933492E-04	p 10 1.0		p 1 1.0	
0.4475522E+02 0.7090332E- 04	0.2038972E+05 0.7386346E- 04		0.39577241 1.0	
0.2303468E+02 0.2331677E- 02	0.5131973E+04 0.6353037E- 03		p 1 1.0	
0.1148848E+02 0.6197486E- 02	0.1617747E+04 0.3915664E- 02		0.16062577 1.0	
0.5532160E+01 - 0.8166974E-02	0.6088671E+03 0.1687077E- 01		p 1 1.0	
s 9 1.0	0.2619986E+03 0.5427476E- 01		0.06219435 1.0	
0.5426780E+03 0.5054927E- 03	0.1239837E+03 0.1344606E+00		d 7 1.0	
0.2917589E+03 0.1552091E- 02	0.6234335E+02 0.2526892E+00		694.39017800 0.00030116	
	0.3232901E+02 0.3455755E+00		221.35251900 0.00262950	
	0.1685520E+02 0.2773604E+00		86.85168800 0.01397035	
			39.53156830 0.04523609	
			19.81107270 0.10723146	
			10.44872690 0.19495108	
			5.58303776 0.27167466	
			d 1 1.0	

2.92992837	1.0		0.69954055	1.0		1.47440650	1.0
d 1	1.0		d 1	1.0		f 1	1.0
1.47440650	1.0		0.30986513	1.0		0.69954055	1.0
d 1	1.0		f 1	1.0		****	
Se							
Se 0			0.3325896E+03	0.3733210E-01		0.2364145E+01	-
s 15	1.0					0.1581118E+00	
0.2029316E+08	0.2300010E-05		0.1691907E+03	0.8486467E-01		s 1	1.0
0.3292685E+07	0.1773010E-04		0.8643183E+02	0.6367636E-01		1.06554130	1.0
0.6780274E+06	0.1123106E-03		0.4385780E+02	-		s 1	1.0
0.1713347E+06	0.5450530E-03		0.2318491E+00	-		0.46847783	1.0
0.5149117E+05	0.2139581E-02		0.2191425E+02	-		s 1	1.0
0.1787651E+05	0.7020873E-02		0.6050585E+00	-		0.20191393	1.0
0.6979943E+04	0.1982979E-01		0.1071341E+02	-		s 1	1.0
0.2990760E+04	0.4909315E-01		0.3585269E+00	-		0.08592550	1.0
0.1375299E+04	0.1067050E+00		s 7	1.0		p 10	1.0
0.6652859E+03	0.1989180E+00		0.3325896E+03	0.1384624E-02		0.2162753E+05	0.7321197E-04
0.3325896E+03	0.2961268E+00		0.1691907E+03	0.1862529E-02		0.5583513E+04	0.6042992E-03
0.1691907E+03	0.2988492E+00		0.8643183E+02	0.8090456E-02		0.1774462E+04	0.3724862E-02
0.8643183E+02	0.1483520E+00		0.4385780E+02	-0.3004000E-01		0.6654759E+03	0.1634787E-01
0.4385780E+02	0.2039468E-01		0.2191425E+02	-		0.2833853E+03	0.5406169E-01
0.2191425E+02	0.1329487E-02		0.1829864E+00	-		0.1323425E+03	0.1371522E+00
s 8	1.0		0.1071341E+02	-		0.6570844E+02	0.2604318E+00
0.1375299E+04	0.1814917E-02		0.2286716E+00	-		0.3375130E+02	0.3512538E+00
0.6652859E+03	0.1013858E-01		0.5103277E+01	0.4467786E+00		0.1751781E+02	0.2700622E+00
			s 6	1.0		0.9007138E+01	0.8155880E-01
			0.8643183E+02	0.9604289E-03		p 5	1.0
			0.4385780E+02	-		0.6570844E+02	-
			0.2434050E-02	-		0.4890918E-02	
			0.2191425E+02	-			
			0.1206625E-02	-			
			0.1071341E+02	-			
			0.7221552E-02	-			
			0.5103277E+01	0.2597894E-02			

0.3375130E+02	-	1.00406775	1.0	9.70253425	0.18139699
0.2721708E-01		p 1	1.0	5.75419023	0.24244495
0.1751781E+02		0.43955653	1.0	d 1	1.0
0.2716549E-01		p 1	1.0	3.27075036	1.0
0.9007138E+01		0.18261899	1.0	d 1	1.0
0.2350880E+00		p 1	1.0	1.74163889	1.0
0.4514752E+01		0.07219445	1.0	d 1	1.0
0.5244333E+00		d 9	1.0	0.85435723	1.0
p 5	1.0	2794.68119000	0.00001998	d 1	1.0
0.3375130E+02	-	706.44388900	0.00031857	0.38199215	1.0
0.6226333E-03		238.07656200	0.00255332	f 1	1.0
0.1751781E+02	0.5976253E-03	100.19690100	0.01147845	1.74163889	1.0
0.9007138E+01	0.1503799E-02	49.62899400	0.03221167	f 1	1.0
0.2179057E+01	-	27.43120030	0.06733198	0.85435723	1.0
0.2572463E-01		16.14011690	0.11956496	****	
p 1	1.0				
Br					
Br 0		0.2128420E+03		0.9562277E+02	-0.8415351E-01
s 13	1.00	0.3845128E+00		0.4484564E+02	0.2782801E+00
0.4145546E+08	0.1109903E-05	0.9562277E+02		0.2168626E+02	0.6281930E+00
0.5185855E+07	0.1252005E-04	0.1850255E+00	0.1817474E-01	0.1070273E+02	0.2974154E+00
0.8295720E+06	0.1095302E-03	0.4484564E+02	0.4779215E-02	s 9	1.0
0.1645638E+06	0.7295800E-03	0.2168626E+02	0.3933698E+05	0.3542413E+04	0.2617525E-05
0.3933698E+05	0.3847673E-02	0.1103274E+05	-0.3551172E-05	0.1273078E+04	0.1066363E-04
0.1103274E+05	0.1644600E-01	0.3542413E+04	-0.6055770E-04	0.5017025E+03	0.7582270E-04
0.3542413E+04	0.5748326E-01	0.1273078E+04	-0.7031015E-03	0.2128420E+03	0.9127227E-04
0.1273078E+04	0.1594102E+00	0.5017025E+03	-0.5544006E-02	0.9562277E+02	0.4901246E-04
0.5017025E+03	0.3219845E+00	0.2128420E+03	-0.3025769E-01	0.4484564E+02	0.4370462E-03
			-0.9493815E-01		

0.2168626E+02	0.9358895E-	0.1076682E+05	0.2800802E-	0.3767855E+01	-0.3607419E-
02		03		01	
0.1070273E+02	0.4904378E-	0.2664825E+04	0.2509140E-	p 1 1.0	
02		02		1.59709077	1.0
0.5346605E+01	-0.1339263E-	0.8053517E+03	0.1626912E-	p 1 1.0	
01		01			
s 8 1.0		0.2826382E+03	0.7389733E-	0.65770152	1.0
		01			
0.5017025E+03	-0.4492092E-	0.1102256E+03		p 1 1.0	
03		0.2293394E+00		0.262945940	1.0
0.2128420E+03	-0.7064856E-	0.4599426E+02		p 1 1.0	
02		0.4356786E+00			
0.9562277E+02	-0.1850199E-	0.1989494E+02		0.10261297	1.0
01		0.3685273E+00		d 4 1.0	
0.4484564E+02					
0.1019120E+00		p 6 1.0		472.20303700	0.00099303
0.2168626E+02		0.8053517E+03	-0.1465709E-	144.24590200	0.00940307
0.7641537E+00		03		52.45266720	0.05032686
0.1070273E+02		0.2826382E+03	-0.1020553E-	21.12839240	0.16955181
0.5721666E+00		02			
0.5346605E+01	-	0.1102256E+03	-0.8837969E-	d 1 1.0	
0.1528271E+01		02		8.88415963	1.0
0.2686907E+01	-	0.4599426E+02	-0.2422786E-	d 1 1.0	
0.2390023E+01		01			
s 1 1.0		0.1989494E+02	-0.1805297E-	3.72138294	1.0
		01		d 1 1.0	
1.35277100	1.0	0.8696274E+01		1.50068110	1.0
s 1 1.0		0.1844939E+00			
0.68090731	1.0	p 5 1.0		d 1 1.0	
s 1 1.0		0.1102256E+03	-0.9002376E-	0.57016071	1.0
		04		f 1 1.0	
0.34263169	1.0	0.4599426E+02	0.2992587E-	1.50068110	1.0
s 1 1.0		03			
0.17270920	1.0	0.1989494E+02	-0.1254148E-	f 1 1.0	
		02		0.57016071	1.0
p 7 1.0		0.8696274E+01	-0.7907740E-	****	
		02			
Kr					
Kr 0		0.3517143E+07	0.1841000E-	0.5943239E+05	0.2034110E-
		04		02	
s 15 1.0		0.7481793E+06	0.1124400E-	0.2093468E+05	0.6575460E-
		03		02	
0.2081419E+08	0.2539998E-	0.1939419E+06	0.5295100E-	0.8259958E+04	0.1840683E-
05		03		01	

0.3565370E+04 01	0.4542901E-	0.2049617E+03 0.9547547E-03	-	0.2377272E+04 02	0.2816097E-
0.1648026E+04 01	0.9907712E-	0.1052081E+03 0.2791831E-02	-	0.8773127E+03 01	0.1301244E-
0.8002845E+03 0.1869840E+00		0.5374082E+02 02	0.7125819E-	0.3655294E+03 01	0.4583732E-
0.4014248E+03 0.2859368E+00		0.2710057E+02 01	0.4579442E-	0.1666469E+03 0.1247120E+00	
0.2049617E+03 0.3051681E+00		0.1341475E+02 01	0.7233277E-	0.8083393E+02 0.2527177E+00	
0.1052081E+03 0.1688214E+00		0.6495295E+01 0.9680863E-01	-	0.4069366E+02 0.3587804E+00	
0.5374082E+02 01	0.2860874E-	s 8 1.0		0.2080707E+02 0.2867441E+00	
0.2710057E+02 02	0.1190354E-	0.4014248E+03 0.2709663E-03	-	0.1060868E+02 01	0.8871945E-
s 10 1.0		0.2049617E+03 0.9833528E-03		p 7 1.0	
0.8259958E+04 04	-0.6514408E-	0.1052081E+03 0.1138391E-02		0.3655294E+03 0.1661784E-03	-
0.3565370E+04 03	-0.4975753E-	0.5374082E+02 0.4904335E-02	-	0.1666469E+03 0.2832488E-02	-
0.1648026E+04 02	-0.2664293E-	0.2710057E+02 0.9244937E-01	-	0.8083393E+02 0.9369356E-02	-
0.8002845E+03 01	-0.1101479E-	0.1341475E+02 0.1313419E+00	-	0.4069366E+02 0.2584222E-01	-
0.4014248E+03 01	-0.3669710E-	0.6495295E+01 0.1953356E+00		0.2080707E+02 0.4802201E-02	
0.2049617E+03 01	-0.8428612E-	0.3072410E+01 0.6337869E+00		0.1060868E+02 0.1463509E+00	
0.1052081E+03 01	-0.7887808E-	s 1 1.0		0.5312421E+01 0.3172358E+00	
0.5374082E+02 0.1812591E+00		1.42117155 1.0		p 6 1.0	
0.2710057E+02 0.5945864E+00		s 1 1.0		0.8083393E+02 03	0.1518049E-
0.1341475E+02 0.4364037E+00		0.64490234 1.0		0.4069366E+02 03	0.1099707E-
s 9 1.0		s 1 1.0		0.2080707E+02 0.2131982E-03	-
0.1648026E+04 0.5916167E-04	-	0.12842660 1.0		0.1060868E+02 0.7478666E-02	-
0.8002845E+03 0.4798901E-04	-	p 10 1.0		0.5312421E+01 0.1929528E-01	-
0.4014248E+03 0.6104104E-03	-	0.2892981E+05 04	0.5402553E-	0.2581781E+01 0.5089185E-01	-
		0.7528019E+04 03	0.4440763E-		

p 1 1.0		280.15626700	0.00272932	1.22397879	1.0
1.20713763	1.0	106.73443700	0.01603882	d 1 1.0	
p 1 1.0		46.23552470	0.05842583	0.54523338	1.0
0.54003221	1.0	21.76706400	0.15055752	f 1 1.0	
p 1 1.0		10.70823280	0.27020073	1.22397879	1.0
0.23063375	1.0	d 1 1.0		f 1 1.0	
p 1 1.0		5.32385133	1.0	0.54523338	1.0
0.09411987	1.0	d 1 1.0		****	
d 6 1.0		2.60240992	1.0		
879.89840300	0.00030153	d 1 1.0			
Rb					
Rb 0		0.4759924E+02	0.1176908E-01	0.7516356E+01	0.6779523E-01
s 17 1.0		0.2615740E+02	0.1086888E-02	s 11 1.0	
0.3889001E+08	0.1190001E-05	0.1418983E+02	0.2055754E-03	0.2489858E+04	-0.4304825E-04
0.7277544E+07	0.7600010E-05	s 12 1.0		0.1162603E+04	-0.3851767E-04
0.1599612E+07	0.4650005E-04	0.1422681E+05	-	0.5745701E+03	-0.5127549E-03
0.4073516E+06	0.2311102E-03	0.2461319E-04		0.2969252E+03	-0.3240028E-03
0.1185709E+06	0.9739806E-03	0.5713750E+04	-	0.1585509E+03	-0.2169602E-02
0.3892749E+05	0.3516900E-02	0.2240870E-03		0.8646096E+02	0.1782386E-02
0.1422681E+05	0.1102502E-01	0.2489858E+04	-	0.4759924E+02	-0.9836485E-03
0.5713750E+04	0.3018589E-01	0.1357640E-02		0.2615740E+02	0.7335791E-02
0.2489858E+04	0.7188350E-01	0.1162603E+04	-	0.1418983E+02	-0.1669538E-01
0.1162603E+04	0.1459975E+00	0.6234723E-02		0.7516356E+01	0.3720309E-01
0.5745701E+03	0.2421149E+00	0.5745701E+03	-	0.3846206E+01	-0.7105028E-01
0.2969252E+03	0.3002736E+00	0.2219195E-01		s 10 1.0	
0.1585509E+03	0.2375748E+00	0.2969252E+03	-	0.5745701E+03	-0.3480214E-04
0.8646096E+02	0.9245518E-01	0.5826005E-01		0.2969252E+03	0.2849247E-03
		0.1585509E+03	-		
		0.9092566E-01			
		0.8646096E+02	-		
		0.1791307E-01			
		0.4759924E+02			
		0.2579283E+00			
		0.2615740E+02			
		0.5148738E+00			
		0.1418983E+02			
		0.3420239E+00			

0.1585509E+03	0.7146200E-	0.01881388	1.0	0.5404074E+02	0.6748857E-
		p 11	1.0		04
0.8646096E+02	0.1269691E-	0.4097298E+05	0.3298983E-	0.2782505E+02	0.7075899E-
		04		03	
0.4759924E+02	-0.1016264E-	0.1039787E+05	0.2853372E-	0.1435712E+02	-0.5894683E-
01		03		02	
0.2615740E+02	-0.5299840E-	0.3225481E+04	0.1869206E-	0.7321782E+01	-0.1445961E-
01		02		01	
0.1418983E+02	-0.6893434E-	0.1175912E+04	0.8941140E-	0.3653150E+01	-0.5454038E-
01		02		01	
0.7516356E+01	0.8058501E-	0.4861781E+03	0.3267429E-	0.1771677E+01	0.2890511E-
01		01		01	
0.3846206E+01				p 1	1.0
0.2120047E+00		0.2207737E+03	0.9369842E-		
		01		0.83275122	1.0
0.1881425E+01		0.1070297E+03		p 1	1.0
0.1262215E+00		0.2057369E+00			
s 9	1.0			0.37965441	1.0
0.1585509E+03	0.3445442E-	0.5404074E+02		p 1	1.0
03		0.3304152E+00			
0.8646096E+02	-	0.2782505E+02		0.16862238	1.00
0.1978986E-03		0.3323503E+00		p 1	1.0
0.4759924E+02	-	0.1435712E+02		0.07355099	1.0
0.4596164E-03		0.1545049E+00			
0.2615740E+02	-	0.7321782E+01	0.2250483E-	d 9	1.0
0.2751475E-02		01		24226.59570000	0.00000032
		p 8	1.0	4373.45219000	0.00001190
0.1418983E+02	0.8302071E-	0.4861781E+03	-0.3100922E-	1093.46489000	0.00020834
05		03		354.55038600	0.00190402
0.7516356E+01	-	0.2207737E+03	-0.1774905E-	140.44556300	0.01042922
0.1885651E-02		02		64.41386990	0.03604516
0.3846206E+01	-	0.1070297E+03	-0.9073413E-	32.61343390	0.08989952
0.6018002E-01		02		17.48573830	0.17448890
0.1881425E+01	-	0.5404074E+02	-0.2242949E-	9.58046008	0.26089880
0.1917023E+00		01			
0.8707455E+00		0.2782505E+02	-0.2463543E-		
0.2727740E+00		01			
s 1	1.0	0.1435712E+02		d 1	1.0
0.37744524	1.0	0.1578257E+00		5.20796936	1.0
s 1	1.0	0.7321782E+01		d 1	1.0
0.15172953	1.0	0.4926857E+00		2.74356306	1.0
s 1	1.0	0.3653150E+01		d 1	1.0
0.05601726	1.0	0.8634214E+00		1.37635620	1.0
s 1	1.0	p 7	1.0		
		0.1070297E+03	0.1823955E-	d 1	1.0
		03			

0.65004151	1.0	1.37635620	1.0	0.65004151	1.0
f 1	1.0	f 1	1.0	****	
Sr					
Sr 0		0.4614473E+04	0.4069196E-03	0.8387238E+01	0.7238493E-02
s 16	1.0				
0.2509542E+08	0.2140060E-05	0.1986107E+04	0.2513663E-02	0.4239033E+01	0.6938516E-01
0.5049723E+07	0.1223992E-04	0.9086796E+03	0.1160822E-01	s 9	1.0
0.1175466E+07	0.7061990E-04	0.4369666E+03	0.4021408E-01	0.4369666E+03	-0.1778412E-04
0.3125434E+06	0.3342995E-03	0.2184260E+03	0.8909730E-01	0.2184260E+03	-0.1765932E-03
0.9374417E+05	0.1367418E-02	0.1122679E+03	0.6924001E-01	0.1122679E+03	-0.3797118E-03
0.3133109E+05	0.4862580E-02	0.5870389E+02	-	0.5870389E+02	0.1363099E-02
0.1152803E+05	0.1519720E-01	0.1855550E+00		0.3090225E+02	0.1296417E-01
0.4614473E+04	0.4175226E-01	0.3090225E+02	-	0.1620933E+02	0.2064091E-01
0.1986107E+04	0.9946661E-01	0.5290551E+00		0.8387238E+01	-0.1715468E-01
0.9086796E+03		0.1620933E+02	-	0.4239033E+01	-0.6631416E-01
0.1977230E+00		0.4032581E+00		0.2072579E+01	-0.4003257E-01
0.4369666E+03		0.8387238E+01	-0.8058854E-01	s 8	1.0
0.3030100E+00		s 10	1.0	0.1122679E+03	-
0.2184260E+03		0.1986107E+04	0.4351399E-05	0.6707401E-03	
0.3053673E+00		0.9086796E+03	0.3896114E-04	0.5870389E+02	0.1633560E-02
0.1122679E+03		0.4369666E+03	0.3525346E-04	0.3090225E+02	-
0.1540005E+00		0.2184260E+03	0.6068372E-03	0.5825608E-02	
0.5870389E+02	0.2429875E-01	0.1122679E+03	-	0.1620933E+02	-
0.3090225E+02	0.6770145E-03	0.6810980E-04		0.4763576E-02	
0.1620933E+02	-	0.5870389E+02	-	0.8387238E+01	-
0.5893822E-03		0.3897737E-03		0.4635607E-02	
s 11	1.0	0.3090225E+02	-	0.4239033E+01	
0.1152803E+05	0.4444252E-04	0.1674432E-01		0.2891873E+00	
		0.1620933E+02	-	0.2072579E+01	
		0.1600929E-01		0.5979317E+00	

0.9710513E+00	-	0.4326175E+03	-	p 1 1.0	
0.8269159E+00		0.2510191E-03			0.14024972 1.0
s 1 1.0		0.1985861E+03	-		
		0.2583613E-02		d 10 1.0	
0.43195410	1.0				
		0.9698169E+02	-	24591.80310000	0.000000034
s 1 1.0		0.9768782E-02		4864.43049000	0.00001038
0.18078519	1.0	0.4910380E+02	-	1319.62414000	0.00015063
		0.2491133E-01			
s 1 1.0				461.07381000	0.00118257
0.07056201	1.0	0.2522520E+02	-	195.95919200	0.00573007
		0.6435101E-02		96.21805020	0.01877979
s 1 1.0		0.1292052E+02		52.13287080	0.04563520
0.02546259	1.0	0.1339053E+00		29.93967370	0.09370921
p 10 1.0		0.6511849E+01		17.60462110	0.16400103
		0.2883491E+00		10.29584670	0.24212569
0.3513081E+05	0.4763703E-04	p 6 1.0			
0.8941150E+04	0.4067341E-03	0.9698169E+02	0.2198422E-04		
				d 1 1.0	
0.2799368E+04	0.2597371E-02	0.4910380E+02	0.2162917E-03	5.85076292	1.0
0.1033212E+04	0.1198267E-01	0.2522520E+02	-	d 1 1.0	
		0.5572139E-03		3.17383951	1.0
0.4326175E+03	0.4205059E-01	0.1292052E+02	-	d 1 1.0	
		0.7130369E-02		1.62380602	1.0
0.1985861E+03		0.6511849E+01	-	d 1 1.0	
0.1149614E+00		0.2542540E-01		0.77850688	1.0
0.9698169E+02		0.3200243E+01	-		
0.2377363E+00		0.6077670E-01		f 1 1.0	
		p 1 1.0		1.62380602	1.0
0.4910380E+02		1.52620362	1.0	f 1 1.0	
0.3517528E+00				0.77850688	1.0
0.2522520E+02		p 1 1.0		****	
0.3031300E+00		0.70584878	1.0		
0.1292052E+02		p 1 1.0			
0.1046529E+00					
p 7 1.0		0.31770263	1.0		
In					
In 0		0.4675624E+06	0.3862700E-03	0.9090676E+04	0.2952843E-01
s 18 1.0					
0.5314133E+08	0.1720002E-05	0.1421946E+06	0.1486854E-02	0.4448007E+04	0.6033984E-01
0.8802694E+07	0.1285965E-04	0.5033870E+05	0.4719528E-02	0.2330762E+04	0.1088832E+00
0.1833803E+07	0.8057780E-04	0.2027337E+05	0.1269307E-01	0.1285490E+04	0.1725957E+00

0.7344550E+03 0.2330251E+00		0.2518480E+03 -0.1099384E-02	0.6998971E+01 0.2144261E-01
0.4284353E+03 0.2504710E+00		0.1474505E+03 -0.4627356E-02	0.3385697E+01 -0.3145190E-01
0.2518480E+03 0.1868440E+00		0.8510218E+02 0.2480111E-01	0.1563446E+01 - 0.2463496E+00
0.1474505E+03 0.7598137E-01		0.4799166E+02 0.6199833E-01	s 1 1.0 0.68889085 1.0
0.8510218E+02 0.1007090E-01		0.2624682E+02 0.7831879E-01	s 1 1.0
0.4799166E+02 - 0.8387496E-03		0.1383694E+02 -0.9669270E-01	0.28991765 1.0 s 1 1.0
0.2624682E+02 - 0.1135071E-02		0.6998971E+01 -0.5673390E-01	0.11681281 1.0
s 11 1.0		s 9 1.0	s 1 1.0
0.4448007E+04 -0.6402586E-03		0.4284353E+03 -0.6140319E-03	0.04523185 1.0 p 11 1.0
0.2330762E+04 -0.3284283E-02		0.2518480E+03 -0.8887227E-03	0.5501523E+05 0.5839912E-04
0.1285490E+04 -0.1118399E-01		0.1474505E+03 -0.1777735E-02	0.1275770E+05 0.5867754E-03
0.7344550E+03 -0.3000607E-01		0.8510218E+02 0.1585082E-01	0.3796489E+04 0.3954574E-02
0.4284353E+03 -0.6118899E-01		0.4799166E+02 0.6693386E-01	0.1382374E+04 0.1783973E-01
0.2518480E+03 -0.7928390E-01		0.2624682E+02 0.9161286E-01	0.5894782E+03 0.5733780E-01
0.1474505E+03 -0.1081959E-02		0.1383694E+02 - 0.1405993E+00	0.2828295E+03 0.1361800E+00
0.8510218E+02 0.2601115E+00		0.6998971E+01 - 0.3992363E+00	0.1472528E+03 0.2422597E+00
0.4799166E+02 0.5126157E+00		0.3385697E+01 - 0.1141894E+00	0.8053825E+02 0.3172465E+00
0.2624682E+02 0.3499664E+00		s 8 1.0	0.4496865E+02 0.2688775E+00
0.1383694E+02 0.6056687E-01		0.1474505E+03 -0.1273236E-02	0.2500384E+02 0.1175673E+00
s 10 1.0		0.8510218E+02 0.5754353E-02	0.1355700E+02 0.1762450E-01
0.1285490E+04 -0.7776667E-03		0.4799166E+02 0.1329047E-01	p 8 1.0
0.7344550E+03 -0.3949195E-03		0.2624682E+02 0.2025790E-01	0.5894782E+03 -0.5505280E-03
0.4284353E+03 -0.3868873E-02		0.1383694E+02 -0.2739194E-01	0.2828295E+03 -0.4557874E-02

0.1472528E+03 01	-0.1401635E-	0.2500384E+02 02	0.1901564E-	0.2318906E+02 0.2335587E+00	
0.8053825E+02 01	-0.3334167E-	0.1355700E+02 02	0.9264368E-	0.1397596E+02 0.2774027E+00	
0.4496865E+02 02	0.6392246E-	0.7045362E+01 01	0.1803508E-	0.8240837E+01 0.2297386E+00	
0.2500384E+02 0.2143027E+00		0.3462571E+01 01	-0.5748207E-	d 4 1.0	
0.1355700E+02 0.6433075E+00		0.1593948E+01 0.1272010E+00	-	0.2318906E+02 02	0.1121577E-
0.7045362E+01 0.8606776E+00		p 1 1.0		0.1397596E+02 02	0.6780311E-
p 8 1.0		0.68328972 1.0		0.8240837E+01 01	0.3105541E-
0.2828295E+03 04	0.1189026E-	p 1 1.0		0.4620103E+01 0.1495854E+00	
0.1472528E+03 04	0.3427036E-	p 1 1.0		d 1 1.0	
0.8053825E+02 03	0.1550173E-	0.10096924 1.0		2.40916529 1.0	
0.4496865E+02 03	-0.1751341E-	p 1 1.0		d 1 1.0	
0.2500384E+02 02	-0.1983976E-	0.03506294 1.0		1.15054526 1.0	
0.1355700E+02 02	-0.6529730E-	d 9 1.0		d 1 1.0	
0.7045362E+01 01	-0.1422628E-	0.3449247E+04 04	0.9643480E-	0.49876323 1.0	
0.3462571E+01 02	0.4140141E-	0.9020329E+03 02	0.1384080E-	d 1 1.0	
p 7 1.0		0.3142911E+03 02	0.9886022E-	0.19580059 1.0	
0.8053825E+02 04	-0.3356744E-	0.1363296E+03 01	0.3801668E-	f 1 1.0	
0.4496865E+02 03	0.2181907E-	0.6924329E+02 01	0.9236561E-	1.15054526 1.0	
Sn		0.3898694E+02 0.1656506E+00		f 1 1.0	
Sn 0				0.49876323 1.0	
s 17 1.0				****	
0.5791965E+08 05	0.1649978E-	0.4489212E+06 03	0.4374109E-	0.7934617E+04 01	0.3747249E-
0.9100246E+07 04	0.1335968E-	0.1329013E+06 02	0.1739225E-	0.3788331E+04 01	0.7810038E-
0.1819209E+07 04	0.8770817E-	0.4595472E+05 02	0.5683800E-	0.1931371E+04 0.1419176E+00	
		0.1810093E+05 01	0.1570689E-	0.1032610E+04 0.2198365E+00	

0.5696037E+03 0.2726656E+00		0.5527890E+02 - 0.1320779E+00	0.34693528 1.0 s 1 1.0	
0.3194822E+03 0.2381389E+00		0.2966442E+02 - 0.2493133E+00	0.14708794 1.0	
0.1798813E+03 0.1153772E+00		0.1544766E+02 0.2927147E+00	s 1 1.0 0.06098974 1.0	
0.1005486E+03 01	0.1971550E-	0.7774164E+01 0.3423647E+00	p 11 1.0	
0.5527890E+02 03	0.1023542E-	s 8 1.0	0.5624698E+05 04	0.5698952E-
0.2966442E+02 0.8929091E-03	-	0.3194822E+03 02	0.1435114E+05 03	0.4865369E-
s 10 1.0		0.1798813E+03 02	0.4467266E+04 02	0.3153224E-
0.3788331E+04 02	-0.1055446E-	0.1005486E+03 02	0.1636955E+04 01	0.1465767E-
0.1931371E+04 02	-0.5521263E-	0.5527890E+02 01	0.6831683E+03 01	0.5107064E-
0.1032610E+04 01	-0.1927661E-	0.2966442E+02 01	0.3150328E+03 0.1341367E+00	
0.5696037E+03 01	-0.4948614E-	0.1544766E+02 02	0.1561518E+03 0.2592273E+00	
0.3194822E+03 01	-0.8416286E-	0.7774164E+01 - 0.5613892E+00	0.8115447E+02 0.3464810E+00	
0.1798813E+03 01	-0.4327279E-	0.3772077E+01 - 0.2854081E+00	0.4325615E+02 0.2683845E+00	
0.1005486E+03 0.1994140E+00		s 7 1.0	0.2319179E+02 01	0.9279797E-
0.5527890E+02 0.5155148E+00		0.1005486E+03 05	0.1230090E+02 02	0.9114045E-
0.2966442E+02 0.4035386E+00		0.5527890E+02 03	p 8 1.0	
0.1544766E+02 01	0.8130136E-	0.2966442E+02 03	0.6831683E+03 0.4654021E-03	-
s 9 1.0		0.1544766E+02 03	0.3150328E+03 0.3902361E-02	-
0.1032610E+04 02	-0.1142371E-	0.7774164E+01 02	0.1561518E+03 0.1432691E-01	-
0.5696037E+03 03	0.7964778E-	0.3772077E+01 01	0.8115447E+02 0.3139837E-01	-
0.3194822E+03 02	-0.1934512E-	0.1763486E+01 01	0.4325615E+02 01	0.1444033E-
0.1798813E+03 02	0.8763131E-	s 1 1.0	0.2319179E+02 0.2281837E+00	
0.1005486E+03 01	-0.2818661E-	0.79526800 1.0 s 1 1.0	0.1230090E+02 0.5244148E+00	

0.6365120E+01 0.4059816E+00		0.1230090E+02 0.5874432E-02	0.4458353E+02 0.1972054E+00
p 8 1.0		0.6365120E+01 0.6082884E-02	0.2294728E+02 0.3144327E+00
0.3150328E+03 -0.2621473E-03		0.3177450E+01 -0.2739753E-01	0.1200326E+02 0.3353997E+00
0.1561518E+03 -0.5709486E-03		0.1517307E+01 -0.2991222E-01	d 2 1.0
0.8115447E+02 -0.1764055E-02		p 1 1.0	0.1200326E+02 0.1099862E-01
0.4325615E+02 0.6667087E-05		0.68912197 1.0	0.6179865E+01 0.1113234E+00
0.2319179E+02 -0.3176763E-02		p 1 1.0	d 1 1.0
		0.29678139 1.0	3.05650863 1.0
0.1230090E+02 -0.1785429E-01		p 1 1.0	d 1 1.0
		0.12116304 1.0	1.42839162 1.0
0.6365120E+01 -0.6107682E-01		p 1 1.0	d 1 1.0
0.3177450E+01 0.1764336E+00		0.04700634 1.0	0.62518120 1.0
p 8 1.0		d 7 1.0	d 1 1.0
0.1561518E+03 -0.7445511E-05		0.1855311E+04 0.3779431E-03	0.25598650 1.0
0.8115447E+02 -0.4949621E-04		0.5570137E+03 0.3904043E-02	f 1 1.0
0.4325615E+02 0.1931408E-03		0.2086693E+03 0.2325390E-01	1.42839162 1.0
0.2319179E+02 0.1414386E-02		0.9159706E+02 0.8226021E-01	f 1 1.0
			0.62518120 1.0
Sb			****
Sb 0		0.1830133E+05 0.1597521E-01	0.1880378E+03 0.1162510E+00
s 17 1.0		0.8130598E+04 0.3759869E-01	0.1050686E+03 0.2069183E-01
0.4791754E+08 0.2160019E-05		0.3918537E+04 0.7775882E-01	0.5778878E+02 0.1465884E-02
0.7922124E+07 0.1622009E-04		0.2009903E+04 0.1408925E+00	0.3107178E+02 0.4782925E-03
0.1653433E+07 0.1011906E-03		0.1078261E+04 0.2185106E+00	s 11 1.0
0.4229178E+06 0.4828526E-03		0.5956342E+03 0.2720246E+00	0.8130598E+04 0.2554467E-03
0.1289250E+06 0.1854229E-02		0.3341260E+03 0.2388483E+00	0.3918537E+04 0.1575125E-02
0.4563277E+05 0.5897210E-02			0.2009903E+04 0.6425380E-02

0.1078261E+04 01	0.2054572E-	0.5956342E+03 03	-0.8930478E-	0.39538337 1.0	
				s 1 1.0	
0.5956342E+03 01	0.5100946E-	0.3341260E+03 02	-0.2933013E-	0.17327322 1.0	
0.3341260E+03 01	0.8571672E-	0.1880378E+03 02	-0.5590830E-	s 1 1.0	
0.1880378E+03 01	0.4495347E-	0.1050686E+03 01	0.2559703E-	0.07482398 1.0	
				p 11 1.0	
0.1050686E+03 - 0.1982877E+00		0.5778878E+02 0.1713939E+00		0.5624698E+05 04	0.5698952E-
0.5778878E+02 - 0.5142678E+00		0.3107178E+02 0.2776659E+00		0.1435114E+05 03	0.4865369E-
0.3107178E+02 - 0.4040625E+00		0.1624840E+02 - 0.2819076E+00		0.4467266E+04 02	0.3153224E-
0.1624840E+02 -0.8256612E- 01		0.8235822E+01 - 0.1235304E+01		0.1636955E+04 01	0.1465767E-
s 11 1.0		0.4039665E+01 - 0.4459280E+00		0.6831683E+03 01	0.5107064E-
0.3918537E+04 -0.1579507E- 03		s 11 1.0		0.3150328E+03 0.1341367E+00	
0.2009903E+04 -0.3577153E- 03		0.1078261E+04 0.4718407E- 05		0.1561518E+03 0.2592273E+00	
0.1078261E+04 -0.1923367E- 02		0.5956342E+03 0.2145456E- 04		0.8115447E+02 0.3464810E+00	
0.5956342E+03 -0.2903270E- 02		0.3341260E+03 0.7264283E- 04		0.4325615E+02 0.2683845E+00	
0.3341260E+03 -0.7025563E- 02		0.1880378E+03 0.1875362E- 03		0.2319179E+02 01	0.9279797E-
0.1880378E+03 0.8047492E- 03		0.1050686E+03 -0.7769719E- 03		0.1230090E+02 02	0.9114045E-
0.1050686E+03 0.1867607E- 02		0.5778878E+02 -0.4878397E- 02		p 11 1.0	
0.5778878E+02 -0.1697160E- 01		0.3107178E+02 -0.7880640E- 02		0.6192564E+05 04	0.5198970E-
0.3107178E+02 -0.7565990E- 01		0.1624840E+02 0.8044209E- 02		0.1568435E+05 03	0.4501570E-
0.1624840E+02 0.1275347E+00		0.8235822E+01 0.2336993E- 01		0.4860818E+04 02	0.2937424E-
0.8235822E+01 0.1081527E+00		0.4039665E+01 0.1584069E- 01		0.1777425E+04 01	0.1372769E-
s 11 1.0		0.1917681E+01 0.6871525E- 01		0.7415533E+03 01	0.4804802E-
0.2009903E+04 -0.1341238E- 04		s 1 1.0		0.3423179E+03 0.1271822E+00	
0.1078261E+04 -0.1716956E- 03		0.88269441 1.0		0.1700426E+03 0.2492126E+00	
		s 1 1.0			

0.8864810E+02 0.3420730E+00		0.1364241E+02 01	0.2839277E-	0.1956495E+04 03	0.3568306E-
0.4743996E+02 0.2787326E+00		0.7113937E+01 01	0.8745874E-	0.6170940E+03 02	0.3389139E-
0.2556230E+02 0.1048610E+00		0.3585808E+01 0.1820238E+00	-	0.2334105E+03 01	0.2073583E-
0.1364241E+02 01	0.1190342E-	p 8 1.0		0.1010343E+03 01	0.7844812E-
p 8 1.0		0.1700426E+03 05	-0.7091584E-	0.4799992E+02 0.1993556E+00	
0.7415533E+03 03	-0.4168486E-	0.8864810E+02 04	-0.5079791E-	0.2412357E+02 0.3270868E+00	
0.3423179E+03 02	-0.3597786E-	0.4743996E+02 03	0.1535066E-	0.1242336E+02 0.3385751E+00	
0.1700426E+03 01	-0.1340363E-	0.2556230E+02 02	0.1340958E-	d 2 1.0	
0.8864810E+02 01	-0.3097496E-	0.1364241E+02 02	0.5576619E-	0.1242336E+02 01	0.1377391E-
0.4743996E+02 02	0.6222387E-	0.7113937E+01 02	0.7540542E-	0.6382061E+01 0.1257868E+00	
0.2556230E+02 0.2057538E+00		0.3585808E+01 01	-0.2363691E-	d 1 1.0	
0.1364241E+02 0.5161113E+00		0.1733363E+01 01	-0.2800928E-	3.19961227 1.0	
0.7113937E+01 0.4505822E+00		p 1 1.0		d 1 1.0	
p 8 1.0		0.79950733 1.0		1.53921520 1.0	
0.3423179E+03 03	0.2376076E-	p 1 1.0		d 1 1.0	
0.1700426E+03 03	0.5107840E-	0.35109797 1.0		0.70206842 1.0	
0.8864810E+02 02	0.1538410E-	p 1 1.0		d 1 1.0	
0.4743996E+02 03	0.5230191E-	0.14688830 1.0		0.30151683 1.0	
0.2556230E+02 02	0.7056652E-	p 1 1.0		f 1 1.0	
		0.05875119 1.0		1.53921520 1.0	
		d 7 1.0		f 1 1.0	
				0.70206842 1.0	

Te					
Te 0		0.6079503E+07 04	0.2483016E-	0.8756419E+05 02	0.3188838E-
s 16 1.0		0.1192900E+07 03	0.1650411E-	0.3073537E+05 01	0.1010216E-
0.4023489E+08 05	0.2930019E-	0.2934471E+06 03	0.8185151E-	0.1233310E+05 01	0.2681843E-

0.5510586E+04 01	0.6087830E-	0.4108675E+03 02	0.2406111E-	0.2178069E+01 01	-0.8894611E-
0.2676376E+04 0.1190292E+00		0.2288356E+03 02	-0.8575845E-	s 1 1.0	
0.1382341E+04 0.1981807E+00		0.1269613E+03 01	0.1659104E-	0.98413008 1.0	
0.7444921E+03 0.2683012E+00		0.6941505E+02 01	0.9546005E-	s 1 1.0	
0.4108675E+03 0.2653945E+00		0.3708017E+02 0.2803790E+00		0.43229841 1.0	
0.2288356E+03 0.1556709E+00		0.1922956E+02 - 0.1768777E+00		s 1 1.0	
0.1269613E+03 01	0.3708753E-	0.9641257E+01 - 0.4036866E+00		0.07897700 1.0	
0.6941505E+02 02	0.2308939E-	s 8 1.0		p 10 1.0	
0.3708017E+02 03	0.5659719E-	0.4108675E+03 02	0.2145292E-	0.4932158E+05 04	0.8177859E-
s 10 1.0		0.2288356E+03 02	-0.1481326E-	0.1283582E+05 03	0.6711130E-
0.5510586E+04 03	-0.6487612E-	0.1269613E+03 02	0.2997185E-	0.4042014E+04 02	0.4271695E-
0.2676376E+04 02	-0.3707661E-	0.6941505E+02 01	-0.1565133E-	0.1486164E+04 01	0.1961499E-
0.1382341E+04 01	-0.1413549E-	0.3708017E+02 02	-0.5779982E-	0.6174092E+03 01	0.6782112E-
0.7444921E+03 01	-0.3984746E-	0.1922956E+02 01	-0.2550004E-	0.2812519E+03 0.1737781E+00	
0.4108675E+03 01	-0.7938699E-	0.9641257E+01 0.2753042E+00		0.1367250E+03 0.3159303E+00	
0.2288356E+03 01	-0.7192327E-	0.4664378E+01 0.2125938E+00		0.6922784E+02 0.3598667E+00	
0.1269613E+03 0.1168280E+00		s 7 1.0		0.3573381E+02 0.1989970E+00	
0.6941505E+02 0.4726722E+00		0.1269613E+03 05	-0.5214172E-	0.1845718E+02 01	0.3664029E-
0.3708017E+02 0.4797954E+00		0.6941505E+02 03	0.4484953E-	p 6 1.0	
0.1922956E+02 0.1318302E+00		0.3708017E+02 03	0.7473634E-	0.2812519E+03 02	-0.3943231E-
s 9 1.0		0.1922956E+02 03	-0.6060519E-	0.1367250E+03 01	-0.1830641E-
0.1382341E+04 03	0.8876582E-	0.9641257E+01 02	0.6200082E-	0.6922784E+02 01	-0.2855144E-
0.7444921E+03 03	-0.5544857E-	0.4664378E+01 02	-0.2114503E-	0.3573381E+02 0.1450250E+00	
				0.1845718E+02 0.6229972E+00	

0.9390654E+01 0.1192500E+01		1.00707722 1.0		d 2 1.0
p 5 1.0		p 1 1.0		0.1282341E+02 0.1758889E-01
0.6922784E+02 -0.4503800E-03		0.43617258 1.0		0.6499471E+01 0.1469295E+00
0.3573381E+02 0.5253200E-02		0.17948190 1.0		d 1 1.0
0.1845718E+02 0.2012415E-01		p 1 1.0		3.25262656 1.0
0.9390654E+01 0.6707119E-01		0.07026213 1.0		d 1 1.0
0.4645835E+01 -0.1658132E-01		d 7 1.0		1.58404184 1.0
p 4 1.0		0.2029605E+04 0.3498382E-03		d 1 1.0
0.1845718E+02 -0.1018088E-02		0.6728220E+03 0.3017459E-02		0.74248746 1.0
0.9390654E+01 -0.2145187E-02		0.2585881E+03 0.1861020E-01		d 1 1.0
0.4645835E+01 0.1423314E-01		0.1112027E+03 0.7412425E-01		d 1 1.0
0.2212575E+01 0.4584428E-01		0.5182252E+02 0.1993821E+00		f 1 1.0
p 1 1.0		0.2543524E+02 0.3403249E+00		1.58404184 1.0
I		0.1282341E+02 0.3461216E+00		f 1 1.0
I 0				0.74248746 1.0
s 16 1.0				****
0.1793447E+08 0.8100007E-05		0.2025823E+04 0.1515375E+00		
0.3010143E+07 0.5903005E-04		0.1087615E+04 0.2255579E+00		0.8569488E+04 -0.4323102E-03
0.6460647E+06 0.3523403E-03		0.6082740E+03 0.2662112E+00		0.4003745E+04 -0.2153302E-02
0.1715864E+06 0.1584511E-02		0.3486460E+03 0.2230350E+00		0.2025823E+04 -0.8056076E-02
0.5468059E+05 0.5669520E-02		0.2019015E+03 0.1085029E+00		0.1087615E+04 -0.2381870E-01
0.2031656E+05 0.1659636E-01		0.1166997E+03 0.2144816E-01		0.6082740E+03 -0.5445275E-01
0.8569488E+04 0.4076454E-01		0.6664683E+02 0.1422047E-02		0.3486460E+03 -0.8383360E-01
0.4003745E+04 0.8515574E-01		0.3730529E+02 0.2710651E-03		0.2019015E+03 -0.4134263E-01
		s 12 1.0		0.1166997E+03 0.1732685E+00
		0.2031656E+05 -0.5518396E-04		0.6664683E+02 0.4659156E+00

0.3730529E+02 0.4275961E+00		0.6664683E+02 0.1096394E+01		0.13131756 1.0	
				p 9 1.0	
0.2034427E+02 0.1277041E+00		0.3730529E+02 0.1986884E+01		0.4382638E+05 03	0.1100938E-
s 12 1.0		0.2034427E+02 - 0.7116772E+00		0.1094171E+05 03	0.9778282E-
0.8569488E+04 05	-0.1260498E-	0.1076693E+02 - 0.6139926E+01		0.3335490E+04 02	0.6494080E-
0.4003745E+04 05	-0.3671027E-	0.5519701E+01 - 0.3416000E+01		0.1193545E+04 01	0.3053544E-
0.2025823E+04 04	-0.2301762E-	s 12 1.0		0.4835511E+03 0.1046636E+00	
0.1087615E+04 04	-0.4377651E-	0.2025823E+04 05	-0.3311050E-	0.2146495E+03 0.2514667E+00	
0.6082740E+03 03	-0.1550125E-	0.1087615E+04 04	-0.1358619E-	0.1013680E+03 0.3888118E+00	
0.3486460E+03 03	-0.1205325E-	0.6082740E+03 04	-0.6982043E-	0.4961275E+02 0.3067171E+00	
0.2019015E+03 03	-0.1988495E-	0.3486460E+03 03	-0.1873898E-	0.2459722E+02 01	0.8176070E-
0.1166997E+03 03	0.5244887E-	0.2019015E+03 03	-0.2697559E-	p 7 1.0	
0.6664683E+02 03	0.1212286E-	0.1166997E+03 02	0.1176404E-	0.1193545E+04 03	-0.2233921E-
0.3730529E+02 03	0.3028408E-	0.6664683E+02 02	-0.2532755E-	0.4835511E+03 02	-0.2449629E-
0.2034427E+02 05	-0.6278347E-	0.3730529E+02 02	-0.8607668E-	0.2146495E+03 01	-0.1266703E-
0.1076693E+02 02	0.5195968E-	0.2034427E+02 01	-0.2862060E-	0.1013680E+03 01	-0.3150087E-
s 12 1.0		0.1076693E+02 0.4606043E+00		0.4961275E+02 03	0.1974545E-
0.4003745E+04 04	-0.3924540E-	0.5519701E+01 0.5589584E+00		0.2459722E+02 0.1983104E+00	
0.2025823E+04 03	-0.3136015E-	0.2741611E+01 - 0.1220821E+01		0.1211427E+02 0.2250282E+00	
0.1087615E+04 02	-0.2161872E-	s 1 1.0		p 7 1.0	
0.6082740E+03 02	-0.9508178E-	1.32237290 1.0		0.4835511E+03 03	-0.2715807E-
0.3486460E+03 01	-0.2807414E-	s 1 1.0		0.2146495E+03 02	-0.1923874E-
0.2019015E+03 01	-0.3527146E-	0.62208349 1.0		0.1013680E+03 01	-0.1085322E-
0.1166997E+03 0.1606580E+00		s 1 1.0 0.28726107 1.0		0.4961275E+02 01	0.2671162E-
		s 1 1.0			

0.2459722E+02 0.2636279E+00		p 1 1.0		0.6034993E+02 -0.2538887E-02
		0.50684208 1.0		
0.1211427E+02 0.8757067E+00		p 1 1.0		0.2796363E+02 -0.2864863E-02
0.5831552E+01 0.6314470E+00		0.20231749 1.0		0.1339948E+02 0.2058738E-01
		p 1 1.0		d 1 1.0
p 7 1.0		0.07649858 1.0		6.41453463 1.0
0.2146495E+03 0.3530102E-05		d 5 1.0		d 1 1.0
0.1013680E+03 0.3058401E-04		0.1158407E+04 0.1284069E-02		2.98353950 1.0
0.4961275E+02 -0.1079585E-03		0.3690305E+03 0.1183729E-01		d 1 1.0
				1.32006633 1.0
0.2459722E+02 -0.1029766E-02		0.1403569E+03 0.6688518E-01		d 1 1.0
0.1211427E+02 -0.3449586E-02		0.6034993E+02 0.2392778E+00		0.54760367 1.0
				f 1 1.0
0.5831552E+01 -0.3467716E-02		0.2796363E+02 0.4142021E+00		1.32006633 1.0
0.2708598E+01 -0.3332638E-02		d 4 1.0		f 1 1.0
p 1 1.0		0.1403569E+03 -0.2789876E-03		0.54760367 1.0
1.20230628 1.0				*****
Xe				
Xe 0		0.4633931E+04 0.7431527E-01		s 13 1.0
s 17 1.0		0.2363051E+04 0.1356606E+00		0.5701774E+05 0.6749276E-05
0.8195028E+08 0.1319952E-05		0.1265734E+04 0.2121439E+00		0.2228083E+05 0.5900953E-04
0.1233251E+08 0.1133995E-04		0.7004058E+03 0.2683472E+00		0.9723263E+04 0.3616289E-03
0.2385011E+07 0.7726996E-04		0.3945636E+03 0.2443213E+00		0.4633931E+04 0.1625469E-02
0.5741287E+06 0.3965100E-03		0.2234077E+03 0.1280924E+00		0.2363051E+04 0.6110215E-02
0.1669479E+06 0.1607820E-02		0.1257704E+03 0.2581863E-01		0.1265734E+04 0.1846068E-01
0.5701774E+05 0.5322498E-02		0.6977077E+02 0.3899014E-03		0.7004058E+03 0.4599066E-01
0.2228083E+05 0.1482490E-01		0.3787313E+02 -0.8590029E-03		0.3945636E+03 0.7794782E-01
0.9723263E+04 0.3553341E-01				

0.2234077E+03	0.5364397E-	0.1265734E+04	-0.9356346E-	0.2458253E+01	-0.7634448E-
01		03		01	
0.1257704E+03	-	0.7004058E+03	-0.4422245E-	s 1 1.0	
0.1533195E+00		02		1.15185909 1.0	
0.6977077E+02	-	0.3945636E+03	-0.1688376E-	s 1 1.0	
0.4590159E+00		01		0.52707707 1.0	
0.3787313E+02	-	0.2234077E+03	-0.2458943E-	s 1 1.0	
0.4248553E+00		01		0.23703726 1.0	
0.2001382E+02	-0.8569471E-	0.1257704E+03	0.9044632E-	s 1 1.0	
01		01		0.10563888 1.0	
s 13 1.0		0.6977077E+02		p 10 1.0	
0.2228083E+05	0.9732101E-	0.7298028E+00		0.5442395E+05	0.8007946E-
05		0.3787313E+02		04	
0.9723263E+04	0.4004350E-	0.1371629E+01		0.1383193E+05	0.6860390E-
04		0.2001382E+02	-	03	
0.4633931E+04	0.2575357E-	0.8759092E+00		0.4300235E+04	0.4427560E-
03		0.1026313E+02	-	02	
0.2363051E+04	0.7651174E-	0.4634930E+01		0.1573967E+04	0.2034442E-
03		0.5100598E+01	-	01	
0.1265734E+04	0.2859779E-	0.1838638E+01		0.6548743E+03	0.6959833E-
02		s 13 1.0		01	
0.7004058E+03	0.5746844E-	0.4633931E+04	-0.1235888E-	0.6959833E-	
02		06		01	
0.3945636E+03	0.1212225E-	0.2363051E+04	-0.8961757E-	0.3000074E+03	
01		05		0.1754746E+00	
0.2234077E+03	0.4425390E-	0.1265734E+04	-0.6340936E-	0.1470477E+03	
02		04		0.3140731E+00	
0.1257704E+03	-0.1564986E-	0.7004058E+03	-0.2962876E-	0.7517350E+02	
01		03		0.3551045E+00	
0.6977077E+02	-0.5309930E-	0.3945636E+03	-0.1173953E-	0.3919835E+02	
01		02		0.1989045E+00	
0.3787313E+02	-0.2316402E-	0.2234077E+03	-0.1676504E-	0.2045366E+02	0.3817810E-
01		02		01	
0.2001382E+02	-0.4468531E-	0.1257704E+03	0.6231895E-	p 8 1.0	
01		02		0.1573967E+04	-0.9087500E-
0.1026313E+02	-0.5386882E-	0.6977077E+02	0.5015089E-	04	
02		01		0.6548743E+03	-0.7249142E-
s 13 1.0		0.3787313E+02	0.9409303E-	03	
0.9723263E+04	-0.4179630E-	01		0.3000074E+03	-0.4443854E-
06		0.2001382E+02	-0.6105780E-	02	
0.4633931E+04	-0.4545040E-	01		0.1470477E+03	-0.1338466E-
05		0.1026313E+02	-	01	
0.2363051E+04	-0.1398172E-	0.2945270E+00		0.7517350E+02	-0.2010947E-
03		0.5100598E+01	-	01	
		0.1151771E+00			

0.3919835E+02 01	0.6031157E-	0.3919835E+02 01	-0.1293440E-	0.2235062E+02 0.3820276E+00
0.2045366E+02 0.2553345E+00		0.2045366E+02 01	-0.8101110E-	d 5 1.0
0.1051153E+02 0.4093148E+00		0.1051153E+02 0.2081896E+00	-	0.2216576E+03 -0.1739849E-04
p 8 1.0		0.5253291E+01 0.4102559E+00		0.9578111E+02 -0.1138289E-02
0.6548743E+03 04	0.2799512E-	0.2528920E+01 0.1241340E+01		0.4515928E+02 -0.3175378E-02
0.3000074E+03 03	0.1235790E-	p 1 1.0		0.2235062E+02 -0.7770980E-03
0.1470477E+03 03	0.5164079E-	1.16528283 1.0		0.1123192E+02 0.5089841E-01
0.7517350E+02 03	0.4875435E-	p 1 1.0		d 1 1.0
0.3919835E+02 02	-0.1239531E-	0.5123435 1.0		5.57348379 1.0
0.2045366E+02 02	-0.7497380E-	p 1 1.0		d 1 1.0
0.1051153E+02 02	-0.5732000E-	0.21496101 1.0		2.67015181 1.0
0.5253291E+01 02	-0.7783160E-	p 1 1.0		d 1 1.0
p 8 1.0		0.08634557 1.0		1.21408755 1.0
0.3000074E+03 04	0.4263527E-	d 6 1.0		d 1 1.0
0.1470477E+03 03	0.5588874E-	0.1849184E+04 03	0.5234252E-	0.51781920 1.0
0.7517350E+02 03	0.6965535E-	0.5849123E+03 02	0.5108010E-	f 1 1.0
		0.2216576E+03 01	0.2982618E-	1.21408755 1.0
		0.9578111E+02 0.1146591E+00		f 1 1.0
		0.4515928E+02 0.2700503E+00		0.51781920 1.0

Cs				
Cs 0		0.1286927E+06 02	0.2343519E-	0.1424224E+04 0.2323969E+00
s 18 1.0		0.4290645E+05 02	0.8210780E-	0.7311816E+03 0.3013908E+00
0.4114022E+08 05	0.2999478E-	0.1599171E+05 01	0.2460825E-	0.3943856E+03 0.2601379E+00
0.7712367E+07 04	0.1907418E-	0.6578909E+04 01	0.6288555E-	0.2208330E+03 0.1208953E+00
0.1702989E+07 03	0.1157669E-	0.2950159E+04 0.1346370E+00		0.1268574E+03 0.3100880E-02
0.4370884E+06 03	0.5675585E-			

0.7389248E+02 0.4620241E-01	-	0.3943856E+03 0.5235385E-02		s 13 1.0
0.4314251E+02 0.4583758E-01	-	0.2208330E+03 0.4987097E-02		0.1424224E+04 -0.9743400E-03
0.2496213E+02 0.1803505E-01	-	0.1268574E+03 0.2175207E-01		0.7311816E+03 -0.5898108E-02
0.1415281E+02 0.2005749E-02	-	0.7389248E+02 0.1444085E+00	-	0.3943856E+03 -0.2450641E-01
s 13 1.0		0.4314251E+02 0.2484488E+00	-	0.2208330E+03 -0.2943091E-01
0.1599171E+05 0.1127312E-03	-	0.2496213E+02 0.4493183E-01		0.1268574E+03 0.1281043E+00
0.6578909E+04 0.9491246E-03	-	0.1415281E+02 0.6407487E+00		0.7389248E+02 0.8169706E+00
0.2950159E+04 0.5076602E-02	-	0.7776164E+01 0.6429729E+00		0.4314251E+02 0.1449292E+01
0.1424224E+04 0.1951422E-01	-	0.4095335E+01 0.1218782E+00		0.2496213E+02 -0.5860910E-02
0.7311816E+03 0.5349399E-01	-	s 13 1.0		0.1415281E+02 - 0.2317112E+01
0.3943856E+03 0.8990077E-01	-	0.2950159E+04 0.1397465E-05		0.7776164E+01 0.5940098E+00
0.2208330E+03 0.4607864E-01	-	0.1424224E+04 0.6825086E-05		0.4095335E+01 - 0.3636232E+01
0.1268574E+03 0.1690096E+00		0.7311816E+03 0.4590133E-04		0.2045115E+01 - 0.1047583E+02
0.7389248E+02 0.4328556E+00		0.3943856E+03 0.1388592E-03		0.9581124E+00 - 0.3093276E+01
0.4314251E+02 0.4166055E+00		0.2208330E+03 0.1912819E-03		s 1 1.0
0.2496213E+02 0.1642800E+00		0.1268574E+03 0.7652090E-03		0.41669133 1.0 s 1 1.0
0.1415281E+02 0.1997403E-01	0.1328667E-04	0.7389248E+02 0.5210363E-02		0.16649606 1.0 s 1 1.0
0.7776164E+01 0.3498637E-02	0.06049789 1.0	0.4314251E+02 0.9599800E-02		
s 13 1.0		0.2496213E+02 0.2872838E-02		s 1 1.0
0.6578909E+04 0.1328667E-04	0.01978980 1.0	0.1415281E+02 0.3356123E-01		
0.2950159E+04 0.6440062E-04	0.1735985E-03	0.7776164E+01 0.5573131E-01		p 9 1.0
0.1424224E+04 0.4429501E-03	0.9626213E+04 0.1313892E-02	0.4095335E+01 0.1621558E-01		
0.7311816E+03 0.1645940E-02	0.3109269E+04 0.7971080E-02	0.2045115E+01 0.4738944E-01		

0.1155247E+04 01	0.3524775E-	0.1200141E+02 01	-0.4851989E-	0.1342566E+03 01	0.6684396E-
0.4779981E+03 0.1162898E+00		0.5847523E+01 02	0.2774906E-	0.6579730E+02 0.1736897E+00	
0.2139797E+03 0.2708502E+00		p 7 1.0		0.3436153E+02 0.2948101E+00	
0.1010451E+03 0.3975894E+00		0.2139797E+03 04	-0.4351384E-	0.1847774E+02 0.3412322E+00	
0.4924878E+02 0.2818635E+00		0.1010451E+03 03	-0.2410705E-	d 6 1.0	
0.2432730E+02 01	0.6366726E-	0.4924878E+02 02	0.1375325E-	0.3036648E+03 04	-0.9934659E-
p 7 1.0		0.2432730E+02 01	0.1466409E-	0.1342566E+03 03	-0.5610946E-
0.1155247E+04 03	-0.3269084E-	0.1200141E+02 01	0.4863849E-	0.6579730E+02 02	-0.3290638E-
0.4779981E+03 01	-0.1423737E-	0.5847523E+01 01	-0.8635689E-	0.3436153E+02 02	-0.3432011E-
0.2139797E+03 01	-0.6213097E-	0.2792635E+01 0.3387884E+00	-	0.1847774E+02 02	0.3082051E-
0.1010451E+03 0.1937215E+00	-	p 1 1.0		0.9938380E+01 01	0.8354800E-
0.4924878E+02 0.2575624E+00		1.30197005 1.0		d 1 1.0	
0.2432730E+02 0.1976138E+01		p 1 1.0		5.22048208 1.0	
		0.59226211 1.0		d 1 1.0	
0.1200141E+02 0.4186599E+01		p 1 1.0		2.62863595 1.0	
p 7 1.0		0.26367868 1.0		d 1 1.0	
0.4779981E+03 03	0.1499750E-	p 1 1.0		1.25178775 1.0	
		0.11565015 1.0		d 1 1.0	
0.2139797E+03 03	0.6201929E-	d 7 1.0		0.55914690 1.0	
0.1010451E+03 02	0.2099231E-	0.2543066E+04 03	0.3049715E-	f 1 1.0	
0.4924878E+02 02	-0.3021804E-	0.7961278E+03 02	0.2920720E-	1.25178775 1.0	
0.2432730E+02 01	-0.2154111E-	0.3036648E+03 01	0.1791833E-	f 1 1.0	
				0.55914690 1.0	
Ba				****	
Ba 0		0.6043518E+07 04	0.2500297E-	0.4024382E+06 03	0.6297331E-
s 16 1.0		0.1464980E+07 03	0.1383563E-	0.1237778E+06 02	0.2503050E-
0.2860319E+08 05	0.4739937E-				

0.4212162E+05	0.8701391E-02	0.9778826E+01	0.6656052E-02	0.1947640E+02	0.9368134E-01
0.1567545E+05	0.2662746E-01	s 12 1.0		0.9778826E+01	0.3703251E+00
0.6306860E+04	0.7103639E-01	0.1567545E+05	0.2810043E-04	0.4788960E+01	0.9370977E-03
0.2712702E+04		0.6306860E+04	0.1649517E-03	0.2266763E+01	-
0.1598329E+00		0.2712702E+04	0.1071077E-02	0.2143752E+00	
0.1233660E+04		0.1233660E+04	0.3869161E-02	s 12 1.0	
0.2812414E+00		0.5868059E+03	0.1034714E-01	0.2712702E+04	-0.3004973E-04
0.5868059E+03		0.2888624E+03	0.6265755E-02	0.1233660E+04	-0.4156327E-03
0.3307700E+00		0.1456362E+03	-0.3368456E-02	0.5868059E+03	-0.2815972E-02
0.2888624E+03		0.7443973E+02	0.9345916E-01	0.2888624E+03	-0.8676295E-02
0.1957839E+00		0.3819135E+02		0.1456362E+03	0.1926930E-01
0.1456362E+03	0.5892643E-01	0.2477398E+00		0.7443973E+02	0.2391076E+00
0.7443973E+02	0.7407214E-01	0.1947640E+02	-	0.3819135E+02	
0.3819135E+02	0.5676638E-01	0.3903994E+00		0.4402759E+00	
0.1947640E+02	0.1025462E-01	0.9778826E+01	-	0.1947640E+02	-
s 12 1.0		0.8813848E+00		0.5579982E+00	
0.4212162E+05	-0.1676288E-04	0.4788960E+01	-	0.9778826E+01	-
0.1567545E+05	-0.1790963E-03	0.2071252E+00		0.2607763E+01	
0.6306860E+04	-0.1314261E-02	s 12 1.0		0.4788960E+01	
0.2712702E+04	-0.7234878E-02	0.6306860E+04	-0.7971945E-06	0.1049711E+00	
0.1233660E+04	-0.3023428E-01	0.2712702E+04	0.2911034E-05	0.2266763E+01	
0.5868059E+03	-0.8356955E-01	0.1233660E+04	0.5941386E-04	0.2881789E+01	
0.2888624E+03	-0.9874261E-01	0.5868059E+03	0.4914207E-03	0.1027797E+01	
0.1456362E+03		0.2888624E+03	0.1529165E-02	0.6634463E+00	
0.1458298E+00		0.1456362E+03	-0.3398153E-02	s 1 1.0	
0.7443973E+02		0.7443973E+02	-0.4310207E-01	0.44254930	1.0
0.5490334E+00		0.3819135E+02	-0.7585198E-01	s 1 1.0	
0.3819135E+02				0.06792943	1.0
0.4317306E+00				s 1 1.0	
0.1947640E+02	0.7821098E-01			0.02382279	1.0
				p 9 1.0	

0.4080943E+05 03	0.1493919E-	0.1400159E+02 - 0.1113453E+00		d 6 1.0	
0.1057492E+05 02	0.1227797E-	0.6945326E+01 -0.4492392E- 01		0.3322200E+03 - 0.8793483E-04	
0.3332311E+04 02	0.7671010E-	p 7 1.0		0.1453286E+03 - 0.5628462E-03	
0.1226906E+04 01	0.3411000E-	0.2305571E+03 -0.1175504E- 05		0.6968247E+02 - 0.3389209E-02	
0.5091104E+03 0.1113332E+00		0.1107733E+03 -0.1447366E- 05		0.3542571E+02 - 0.4067190E-02	
0.2305571E+03 0.2563435E+00		0.5510589E+02 0.1130311E- 04		0.1855588E+02 0.5996153E- 02	
0.1107733E+03 0.3822617E+00		0.2780852E+02 0.5768679E- 03		0.9775274E+01 0.1070465E+00	
0.5510589E+02 0.2950574E+00		0.1400159E+02 0.3420219E- 02		d 1 1.0	
0.2780852E+02 01	0.8819844E-	0.6945326E+01 -0.1110432E- 01		5.07863378 1.0	
p 7 1.0		0.3364439E+01 -0.5907884E- 01		d 1 1.0	
0.1226906E+04 - 0.2876587E-03		p 1 1.0		2.56325857 1.0	
0.5091104E+03 - 0.1904638E-02		1.58387001 1.0		d 1 1.0	
0.2305571E+03 - 0.1026791E-01		p 1 1.0		1.24363473 1.0	
0.1107733E+03 - 0.1907940E-01		0.72391627 1.0		d 1 1.0	
0.5510589E+02 - 0.9938371E-02		p 1 1.0		0.57656188 1.0	
0.2780852E+02 01	0.8939754E-	0.14056499 1.0		f 1 1.0	
0.1400159E+02 - 0.8717271E-01		d 7 1.0		1.24363473 1.0	
p 7 1.0		0.2670967E+04 0.2916589E- 03		f 1 1.0	
0.5091104E+03 0.1719064E- 03		0.8644564E+03 0.2631620E- 02		0.57656188 1.0	
0.2305571E+03 0.7361689E- 03		0.3322200E+03 0.1635519E- 01		****	
0.1107733E+03 0.2910926E- 02		0.1453286E+03 0.6425637E- 01			
0.5510589E+02 -0.4218830E- 02		0.6968247E+02 0.1752787E+00			
0.2780852E+02 -0.3696250E- 01		0.3542571E+02 0.3104909E+00			
		0.1855588E+02 0.3514740E+00			