**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE QUÍMICA DE SÃO CARLOS**

Júlia Maria Aragon Alves

**Desenvolvimento de conjuntos de base para os átomos H,
Li, B-F, Na e Al-Cl em ambiente aniônico utilizando o
Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock
Polinomial**

São Carlos

2021

Júlia Maria Aragon Alves

**Desenvolvimento de conjuntos de base para os átomos H,
Li, B-F, Na e Al-Cl em ambiente aniônico utilizando o
Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock
Polinomial**

Tese apresentada ao Instituto de Química de
São Carlos, da Universidade de São Paulo,
como parte dos requisitos para a obtenção do
título de Doutor em Ciências no Programa
Química.

Área de concentração: Físico-Química

Orientador: Prof. Dr. Albérico Borges Ferreira
da Silva

**São Carlos
2021**

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

Assinatura:

Data:

Ficha Catalográfica elaborada pela Seção de Referência e Atendimento ao Usuário do SBI/IQSC

Alves, Júlia Maria Aragon

Desenvolvimento de conjuntos de base para os átomos H, Li, B-F, Na e Al-Cl em ambiente aniônico utilizando o método da coordenada geradora Hartree-Fock polinomial / Júlia Maria Aragon Alves. — São Carlos, 2021.
342 f.

Tese (Doutorado em Físico-Química) — Instituto de Química de São Carlos / Universidade de São Paulo, 2021.

Orientador: Prof. Dr. Albérico Borges Ferreira da Silva

1. Química teórica. 2. Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock Polinom. 3. Expoentes difusos. 4. Testes moleculares. 5. Conjunto de Bases Aniônicos. I. Título.

AGRADECIMENTOS

O caminho percorrido para a conclusão do doutorado não foi fácil, além do desafio intelectual, precisei encarar a depressão e a ansiedade e por diversas vezes pensei em desistir, porém graças a uma rede de apoio, consegui chegar ao final dessa trajetória muito grata pela realização dessa grande meta.

Portanto, primeiramente, gostaria de agradecer ao apoio e amor incondicional da minha mãe, Luciana, e toda a minha família que ao longo dessa jornada, sempre me incentivou e não me deixou desistir.

Agradeço imensamente aos meus companheiros de laboratório pelos aconselhamentos, inspirações, ensinamentos e bons momentos juntos e ao meu orientador prof. Dr. Albérico B. F. da Silva por me receber no grupo de pesquisa e lições aprendidas.

Nessa jornada, precisei mudar do Espírito Santo (minha casa) para São Paulo, essa foi uma experiência extremamente enriquecedora e sou eternamente grata às amizades que conquistei durante esse período, muitas delas me acompanharão por muito anos. Da mesma forma, sou muito grata pelo apoio dos meus amigos do Espírito Santo, pessoas que sempre pude dividir minhas alegrias e angustias.

Preciso mencionar o grupo "Integração Musical" (em C), os conheci em um dos momentos mais difíceis da minha trajetória, mas eles me acolheram e foram como um balsamo nos momentos de angustia, por tanto, a vocês, meu muito obrigada.

Por último, e mais especial, gostaria de agradecer ao Gabriel, que acreditou em mim quando eu mesma não acreditava, me dirigiu palavras doces quando os pensamentos destrutivos me assolavam e estendeu a mão quando imaginei estar sozinha, nunca desistindo de mim. Além de todo o apoio psicológico fundamental, ele ainda me ajudou "colocando a mão na massa", desenvolvendo um programa para selecionar e organizar os dados necessários dos intermináveis arquivos de "*output*" gerados. Certamente, a riqueza de detalhes exibidos nesse documento, só foi possível graças a esse programa e ainda me ajudou a utilizar o "*overleaf*", "programa" de edição que organiza equações, figuras e tabelas de forma primorosa, porém nada trivial. Gabriel, sou muito feliz por ter você na minha vida.

*“Se as coisas são inatingíveis... ora!
Não é motivo para não querê-las...
Que tristes os caminhos, se não fora
a presença distante das estrelas!”*
Mário Quintana

RESUMO

ALVES, Júlia M. A. **Desenvolvimento de conjuntos de base para os átomos H, Li, B-F, Na e Al-Cl em ambiente aniônico utilizando o Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock Polinomial.** 2021. 340 f. Tese (Doutorado em Físico-Química) - Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2021.

A equação de Schrödinger possui solução exata para átomos monoelétrônicos, porém devido ao nível de complexidade das soluções para átomos multieletrônicos, houve a necessidade de se implementar métodos aproximativos 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 gerava os conjuntos de base muito 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, o Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock Polinomial, pMCG-HF. No intuito de gerar um conjunto de base ainda mais difuso para melhorar a descrição de propriedades como polarizabilidade, uma nova metodologia de desenvolvimento de conjuntos de base foi proposta. O pMCG-HF foi utilizando considerando o átomo como uma espécie aniônica, ao invés de neutra como de costume, para almejando um conjunto naturalmente mais difuso. Portanto, os conjuntos de primitivas foram gerados, contraídos e polarizados gerando o conjunto de base aniônico (aMCG) com duas polarizações diferentes. Testes moleculares foram realizados visando analisar a energia total das moléculas, a otimização de geometria, momento dipolo, polarizabilidade e o tempo necessário para obter essas propriedades. Foram selecionadas 49 moléculas com características distintas e foram selecionados os conjuntos de base mais populares da literatura para realizar comparações. Esses testes foram realizados com diferentes métodos recorrentes na literatura, funcionais DFTs e métodos HF e pós-HF, com a finalidade de observar a variação do comportamento dos conjuntos de base selecionados frente ao métodos utilizados. Essa nova metodologia de desenvolvimento de conjuntos de base foi aplicada aos átomos Hidrogênio, Lítio, Boro, Carbono, Nitrogênio, Oxigênio, Flúor, Sódio, Alumínio, Silício, Fósforo, Enxofre e Cloro.

Palavras-chave: Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock Polinomial, Conjunto de Bases Aniônicos, Expoentes Difusos, Testes Moleculares.

ABSTRACT

ALVES, Júlia M. A. **Development of anionic basis sets for H, Li, B-F, Na and Al-Cl atoms with the Polynomial Generator Coordinate Hartree-Fock**

Method. 2021. 340 f. Tese (Doutorado em Físico-Química) - Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2021.

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 describes the atoms and molecule proprieties. 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, requires a larger number of exponentes in the basis sets. 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 Polynomial Generator Coordinate Hartree-Fock. Aim to generate an even tighter exponents to compound the basis sets and consequently improve the accuracy of proprieties such as polarizability, a new methodology of development of basis set were proposed. The pMCG-HF was applied in an anionic environment, instead of the neutral one, achieving a naturally more diffuse basis sets. Therefor, the primitive sets were generated, contracted and polarized, generating the anionic base set (aMCG), with two different forms of polarization. Molecular tests were carried out aiming to analyze the total energy of the molecules, the geometry optimization, dipole moment, polarizability and the time required to obtain those properties. A large set of distinct molecules (49 molecules) were selected and the common basis sets were used to compare the results. The tests were carried out using different literature's methods, *e.g.* DFTs functionals, HF and post-HF methods, the goal were to observe the dependence between the methods and basis sets. This new methodology was applied to the Hydrogen, Lithium, Boron, Carbon, Nitrogen, Oxygen, Fluorine, Sodium, Aluminum, Silicon, Phosphorus, Sulfur and Chlorine atoms.

Keywords: Polynomial Generator Coordinate Hartree-Fock Method, Anionic Basis Sets, Diffuse Exponent, Molecular Tests.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Produto entre funções Gaussianas (G1 e G2)	31
Figura 2 – Esquema de polarização pinçada para o átomo de H	33
Figura 3 – Relação entre os expoentes escolhidos pelas funções igualmente temperadas e bem temperadas	39
Figura 4 – Esquema diferenças entre RHF, ROHF e UHF	45
Figura 5 – Energia de perturbação de primeira ordem e a energia exata do sistema	47
Figura 6 – Aumento da quantidade de determinantes avaliados no método CI completo	48
Figura 7 – Relação entre o aumento do número de elétrons e coordenadas	52
Figura 8 – Exemplo de <i>input</i> para o átomo de carbono do programa ATOM-SCF .	60
Figura 9 – Escolhas possíveis para seleção dos conjuntos de base utilizados para descrever a malha inicial do átomo de C^-	62
Figura 10 – Energias para os conjuntos de primitivas gerados com as malhas de 3, 4 e 5 incrementos	66
Figura 11 – Comparação entre os valores de energia para as malhas iniciais para o átomo de H^- e C^-	66
Figura 12 – Energia dos conjuntos de primitivas iniciais utilizando a malha do conjunto de base universal iônico para o átomo de C^-	67
Figura 13 – Comparação entre os valores de expoentes e coeficientes do conjunto de primitivas do H^-	67
Figura 14 – Comparação entre malhas iniciais para o C^-	68
Figura 15 – Relação entre as energias dos conjuntos de primitivas e o NHF para cada átomo	71
Figura 16 – Relação entre a função peso e os expoentes -Lítio	71
Figura 17 – Relação entre a função peso e os expoentes - Carbono	71
Figura 18 – Relação entre a função peso e os expoentes - Oxigênio	72
Figura 19 – Relação entre a função peso e os expoentes - Fósforo	72
Figura 20 – Relação entre a função peso e os expoentes - Cloro	72
Figura 21 – Relação entre as energias dos conjuntos de primitivas e o NHF para cada átomo	75
Figura 22 – Relação entre as energias dos conjuntos de primitivas e o NHF para cada átomo	75
Figura 23 – Relação entre as energias dos conjuntos de primitivas e o NHF para cada átomo	76
Figura 24 – Energias para o átomo de C^- com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais	83

Figura 25 – Energias para o átomo de O^- com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais	83
Figura 26 – Energias para o átomo de Na^- com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais	84
Figura 27 – Energias para o átomo de Na^- com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais HF e pós-HF	84
Figura 28 – Energias para o átomo de S^- com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais	85
Figura 29 – Energias para o átomo de S^- com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais HF e pós-HF	85
Figura 30 – Energias para o átomo de C com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais	86
Figura 31 – Energias para o átomo de O com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais	86
Figura 32 – Energias para o átomo de Na com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais	87
Figura 33 – Energias para o átomo de S com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais	88
Figura 34 – Energias para o átomo de S com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais	88
Figura 35 – Energias para o átomo de C^+ com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais	89
Figura 36 – Energias para o átomo de O^+ com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais	89
Figura 37 – Energias para o átomo de Na^+ com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais	90
Figura 38 – Energias para o átomo de S^+ com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais	90
Figura 39 – Comparação entre os erros percentuais médios de comprimento e ângulo de ligação	106
Figura 40 – Diferença entre as medidas de energia moleculares calculadas com o funcional B3LYP-sp	115
Figura 41 – Diferença entre as medidas de energia moleculares calculadas com o funcional B3LYP-opt	115
Figura 42 – Diferença entre as medidas de Energia moleculares calculadas com o funcional BLYP	118
Figura 43 – Diferença entre as medidas de energia moleculares calculadas com o funcional BHLYP	123

Figura 44 – Diferença entre as medidas de Energia moleculares calculadas com o funcional PBE0	123
Figura 45 – Diferença entre as medidas de Energia moleculares calculadas com método HF	127
Figura 46 – Geometria, PO_4^{-3} , calculada pelo funcional B3LYP-sp	131
Figura 47 – Diferença entre as medidas de momento dipolo calculadas	141

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Relação entre os métodos HF e pós-HF	51
Tabela 2 – Termos espectroscópicos para átomos aniônicos em seus estados fundamentais	61
Tabela 3 – Comparação entre as energias moleculares dos átomos C, N e O.	69
Tabela 4 – Expoentes utilizados para descrever cada átomo e suas respectivas energias (Hartree)	69
Tabela 5 – Expoentes utilizados para descrever cada átomo e suas respectivas energias (Hartree)	70
Tabela 6 – Testes iniciais para determinar a forma da contração em Hartree	73
Tabela 7 – Energias dos conjuntos de base pré e pós-contração	74
Tabela 8 – Expoentes escolhidos para testar as função de polarização	78
Tabela 9 – Diferença energética entre diferentes tipos de polarização	78
Tabela 10 – Funções de polarização utilizadas e as respectivas energias	79
Tabela 11 – Funções de polarização utilizadas e as respectivas energias	80
Tabela 12 – Comprimento de ligação calculados pelo método DFT e experimental (Å)	92
Tabela 13 – Comprimento de ligação calculados pelo método pós-HF e experimental (Å)	93
Tabela 14 – Erro percentual em relação aos valores experimental de comprimento de ligação	96
Tabela 15 – Comparação entre os ângulos de ligação calculados pelo método DFT e experimental	97
Tabela 16 – Comparação entre os ângulos de ligação calculados pelo método HF e MP2 e experimental	98
Tabela 17 – Erro percentual em relação aos valores experimental de ângulo entre as ligações	99
Tabela 18 – Valores de comprimento de ligação calculados com o funcional B3LYP-opt	102
Tabela 19 – Erro percentual em relação aos valores experimental de comprimento de ligação- B3LYP-opt	103
Tabela 20 – Valores de ângulo de ligações comparado com valores experimental- B3LYP-opt	105
Tabela 21 – Erro percentual em relação aos valores experimental de ângulo entre as ligações - B3LYP-opt	107
Tabela 22 – Resultados de energia em Hartree para o funcional B3LYP-sp	111
Tabela 23 – Resultados de energia em Hartree para o funcional B3LYP-opt	113
Tabela 24 – Resultados de energia em Hartree para o funcional BLYP	116
Tabela 25 – Resultados de energia em Hartree para o funcional BHHLYP	119

Tabela 26 – Resultados de energia em Hartree para o funcional PBE0	121
Tabela 27 – Resultados de Energia em Hartree para o método HF	125
Tabela 28 – Resultados de Energia em Hartree para o método MP2	128
Tabela 29 – Valores de momento dipolo em Debye usando o funcional B3LYP-sp . .	134
Tabela 30 – Valores de momento dipolo em Debye usando o funcional B3LYP-opt .	135
Tabela 31 – Valores de momento dipolo em Debye usando o funcional BLYP	136
Tabela 32 – Valores de momento dipolo em Debye usando o funcional BHHLYP . .	137
Tabela 33 – Valores de momento dipolo em Debye usando o funcional PBE0	138
Tabela 34 – Valores de momento dipolo em Debye usando o método HF	139
Tabela 35 – Valores de momento dipolo em Debye usando o método MP2	140
Tabela 36 – Valores médios de comprimento e ângulo de ligação para a molécula PO_4^{-3}	143
Tabela 37 – Valores médios de comprimento e ângulo de ligação para a molécula CO_3^{-2}	143
Tabela 38 – Valores de polarizabilidade isotrópica em Bohr ³ calculados com o funcional B3LYP-sp	145
Tabela 39 – Valores de polarizabilidade isotrópica em Bohr ³ calculados com o funcional B3LYP-opt	147
Tabela 40 – Valores de polarizabilidade isotrópica em Bohr ³ calculados com o funcional BLYP	149
Tabela 41 – Valores de polarizabilidade isotrópica em Bohr ³ calculados com o funcional BHHLYP	151
Tabela 42 – Valores de polarizabilidade isotrópica em Bohr ³ calculados com o funcional PBE0	153
Tabela 43 – Valores de polarizabilidade isotrópica em Bohr ³ calculados com o funcional HF	155
Tabela 44 – Valores de polarizabilidade isotrópica em Bohr ³ calculados com o funcional MP2	157
Tabela 45 – Tempo computacionais para cálculos com o funcional B3LYP-sp	162
Tabela 46 – Tempo computacionais para cálculos com o funcional B3LYP-opt . . .	164
Tabela 47 – Tempo computacionais para cálculos tipo (<i>single point</i>) com o funcional BLYP	166
Tabela 48 – Tempo computacionais para cálculos tipo (<i>single point</i>) com o funcional BHHLYP	168
Tabela 49 – Tempo computacionais para cálculos tipo (<i>single point</i>) com o funcional PBE0	170
Tabela 50 – Tempo computacionais para cálculos tipo (<i>single point</i>) com o método HF	172
Tabela 51 – Tempo computacionais para cálculos tipo (<i>single point</i>) com o método MP2	174

Tabela 52 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Hidrogênio aniônico . . .	189
Tabela 53 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Lítio aniônico	189
Tabela 54 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Boro aniônico	189
Tabela 55 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Carbono aniônico . . .	189
Tabela 56 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Nitrogênio aniônico . .	190
Tabela 57 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Oxigênio aniônico . . .	190
Tabela 58 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Flúor aniônico	190
Tabela 59 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Sódio aniônico	190
Tabela 60 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Alumínio aniônico . . .	190
Tabela 61 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Silício aniônico	191
Tabela 62 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Fósforo aniônico	191
Tabela 63 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Enxofre aniônico . . .	191
Tabela 64 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Cloro aniônico	191
Tabela 65 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Hidrogênio neutro . . .	192
Tabela 66 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Lítio neutro	192
Tabela 67 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Boro neutro	192
Tabela 68 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Carbono neutro	192
Tabela 69 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Nitrogênio neutro . . .	193
Tabela 70 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Oxigênio neutro	193
Tabela 71 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Flúor neutro	193
Tabela 72 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Sódio neutro	193
Tabela 73 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Alumínio neutro	193
Tabela 74 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Silício neutro	194
Tabela 75 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Fósforo neutro	194
Tabela 76 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Enxofre neutro	194
Tabela 77 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Cloro neutro	194
Tabela 78 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Lítio cátion	195
Tabela 79 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Boro cátion	195
Tabela 80 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Carbono cátion	195
Tabela 81 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Nitrogênio cátion . . .	195
Tabela 82 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Oxigênio cátion	196
Tabela 83 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Flúor cátion	196
Tabela 84 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Sódio cátion	196
Tabela 85 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Alumínio cátion	196
Tabela 86 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Silício cátion	196
Tabela 87 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Fósforo cátion	197
Tabela 88 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Enxofre cátion	197
Tabela 89 – Valores de energia em Hartree para o átomo de Cloro cátion	197
Tabela 90 – Valores de comprimento de ligação para cálculos tipo DFT	200

Tabela 91 – Valores de comprimento de ligação para cálculos HF e MP2	211
Tabela 92 – Valores de ângulo de ligação para cálculos tipo DFT	216
Tabela 93 – Valores de ângulo de ligação para cálculos HF e MP2	229
Tabela 94 – Valores de comprimentos de ligação otimizados com o funcional B3LYP	235
Tabela 95 – Valores de ângulo de ligação otimizados com o funcional B3LYP	243
Tabela 96 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-sp/MCG	254
Tabela 97 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-sp/aMCG-2d1f	255
Tabela 98 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-sp/aMCG-3d2f1g	256
Tabela 99 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-sp/6-311G	257
Tabela 100 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-sp/6-311+G	258
Tabela 101 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-sp/cc-pVDZ	259
Tabela 102 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-sp/aug-cc-pVDZ	260
Tabela 103 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-sp/cc-pVTZ	261
Tabela 104 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-sp/aug-cc-pVTZ	262
Tabela 105 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-sp/pc-3	263
Tabela 106 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-sp/aug- pc-3	264
Tabela 107 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-opt/MCG	265
Tabela 108 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-opt/aMCG-2d1f	266
Tabela 109 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-opt/aMCG-3d2f1g	267
Tabela 110 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-opt/6-311G	268
Tabela 111 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-opt/6-311G+	269
Tabela 112 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-opt/cc-pVDZ	270
Tabela 113 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-opt/aug-cc-pVDZ	271

Tabela 114 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-opt/cc-pVTZ	272
Tabela 115 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-opt/aug-cc-pVTZ	273
Tabela 116 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-opt/pc-3	274
Tabela 117 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BLYP/MCG	275
Tabela 118 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BLYP/aMCG-2d1f	276
Tabela 119 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BLYP/aMCG-3d2f1g	277
Tabela 120 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BLYP/6-311G	278
Tabela 121 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BLYP/6-311G+	279
Tabela 122 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BLYP/cc-pVDZ	280
Tabela 123 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BLYP/aug-cc-pVDZ	281
Tabela 124 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BLYP/cc-pVTZ	282
Tabela 125 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BLYP/aug-cc-pVTZ	283
Tabela 126 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BLYP/pc-3	284
Tabela 127 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BLYP/aug-pc-3	285
Tabela 128 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BHHLYP/MCG	286
Tabela 129 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BHHLYP/aMCG-2d1f	287
Tabela 130 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BHHLYP/aMCG-3d2f1g	288
Tabela 131 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BHHLYP/6-311G	289
Tabela 132 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BHHLYP/6-311G+	290
Tabela 133 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BHHLYP/cc-pVDZ	291
Tabela 134 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BHHLYP/aug-cc-pVDZ	292
Tabela 135 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BHHLYP/cc-pVTZ	293
Tabela 136 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BHHLYP/aug-cc-pVTZ	294
Tabela 137 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BHHLYP/pc-3	295
Tabela 138 – Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BHHLYP/aug-pc-3	296

Tabela 139–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores PBE0/MCG .	297
Tabela 140–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores PBE0/aMCG- 2d1f	298
Tabela 141–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores PBE0/aMCG- 3d2f1g	299
Tabela 142–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores PBE0/6-311G	300
Tabela 143–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores PBE0/6-311G+	301
Tabela 144–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores PBE0/cc-pVDZ	302
Tabela 145–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores PBE0/aug-cc- pVDZ	303
Tabela 146–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores PBE0/cc-pVTZ	304
Tabela 147–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores PBE0/aug-cc- pVTZ	305
Tabela 148–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores PBE0/pc-3 .	306
Tabela 149–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores PBE0/aug-pc-3	307
Tabela 150–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores HF/MCG . .	308
Tabela 151–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores HF/aMCG-2d1f	309
Tabela 152–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores HF/aMCG- 3d2f1g	310
Tabela 153–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores HF/6-311G .	311
Tabela 154–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores HF/6-311G+	312
Tabela 155–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores HF/cc-pVDZ	313
Tabela 156–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores HF/aug-cc-pVDZ	314
Tabela 157–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores HF/cc-pVTZ	315
Tabela 158–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores HF/aug-cc-pVTZ	316
Tabela 159–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores HF/pc-3 . . .	317
Tabela 160–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores HF/aug-pc-3	318
Tabela 161–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores MP2/MCG .	319
Tabela 162–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores MP2/aMCG-2d1f	320
Tabela 163–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores MP2/aMCG- 3d2f1g	321
Tabela 164–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores MP2/6-311G	322
Tabela 165–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores MP2/6-311G+	323
Tabela 166–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores MP2/cc-pVDZ	324
Tabela 167–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores MP2/aug-cc- pVDZ	325
Tabela 168–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores MP2/cc-pVTZ	326
Tabela 169–Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores MP2/aug-cc- pVTZ	327

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

STF's	<i>Slater-Type Function</i>
GTF's	<i>Gaussian-Type Function</i>
DZ	Duplo-Zeta
TZ	Triplo-Zeta
MCG	Método da Coordenada Geradora
MCG-HF	Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock
UGBS	Conjunto de Base Universal
IMCG-HF	Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock Melhorada
pMCG-HF	Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock Polinomial
UBS	Conjunto de Base Universal
<i>cc-pVXZ</i>	<i>Correlation-Consistent Basis Set</i>
HF	Hartree-Fock
MP	Teoria da Perturbação - Moller-Plesset
CI	Interação de Configurações
CC	Teoria dos Pares Acoplados
DFT	Teoria do Funcional Densidade
SCF	Campo auto-consistente
RHF	Hartree-Fock Restrito
ROHF	Hartree-Fock Camada Aberta Restrito
UHF	Hartree-Fock Irrestrito
NHF	Hartree-Fock Numérico
GGA	Aproximação do Gradiente Generalizado
LSDA	<i>Local Spin-Density Approximation</i>

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	27
1.1	Histórico da Química Quântica	27
1.2	Conjuntos de Base	29
1.3	Desenvolvimento dos Conjuntos de Base	33
1.3.1	Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock - MCG-HF	33
1.3.2	Outros Conjunto de Base	37
1.4	Métodos para Cálculos Moleculares	42
1.4.1	Hartree-Fock (HF)	42
1.4.2	Teoria da Perturbação - Møller-Plesset	45
1.4.3	Interação de Configuração - CI	47
1.4.4	Teoria dos Pares Acoplados - CC	49
1.4.5	Teoria do Funcional da Densidade	52
1.4.5.1	Aproximação do Gradiente Generalizado - GGA	54
2	OBJETIVOS	57
3	METODOLOGIA	59
3.1	Geração dos Expoentes do Conjunto de Base	59
3.2	Contração e Polarização	62
3.3	Testes Moleculares	63
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	65
4.1	Geração de Expoentes	65
4.2	Contração e Polarização	73
4.3	Testes Moleculares	91
4.3.1	Geometria	91
4.3.2	Energia	109
4.3.3	Momento Dipolo	130
4.3.4	Polarizabilidade	141
4.3.5	Tempo Computacional	159
5	CONCLUSÃO	177
	REFERÊNCIAS	181

ANEXOS	187
ANEXO A – RESULTADOS DO CÁLCULO DE ENERGIA ATÔMICA PARA ÁTOMOS ANIÔNICOS, NEUTROS E CATIÔNICOS	189
ANEXO B – DETALHES DAS GEOMETRIAS OTIMIZADAS . . .	199
ANEXO C – VALORES DE POLARIZABILIDADE EM CADA DIREÇÃO DOS TENSORES	253
ANEXO D – CONJUNTO DE BASE aMCG-2d1f	329
ANEXO E – CONJUNTO DE BASE aMCG-3d2f1g	335

1 INTRODUÇÃO

1.1 Histórico da Química Quântica

A mecânica clássica ou Newtoniana se destina a estudar corpos de grande massa que se movem abaixo da velocidade da luz, podendo ser capaz de descrever suas trajetórias com precisão através das leis newtonianas, sendo ainda amplamente estudada e aplicada atualmente.^{1, 2}

Para os objetos macroscópicos as leis newtonianas funcionam satisfatoriamente, porém fenômenos como a radiação do corpo negro e o efeito fotoelétrico não puderam ser explicados apenas pelos conceitos da mecânica clássica, ou seja, supor que corpos muito pequenos (moléculas, átomos e partículas subatômicas) moviam-se de forma contínua era um equívoco. Desse modo, houve a necessidade de propor um novo modelo, a mecânica quântica.^{3, 4}

A mecânica quântica teve início em 1900 com as observações de Max Planck, nas quais corpos emitiam ou absorviam somente uma quantidade de energia específica ou quantizada proporcional a $nh\nu$, sendo h a constante de Planck, n o número quântico ($n = 1, 2, 3, \dots$) e ν a frequência. Pouco depois, em 1924, Louis de Broglie sugeriu que as partículas se comportariam de forma dual, podendo ser interpretada ora como partícula, ora como onda.^{1, 3, 5}

A descoberta do princípio da incerteza por Werner Heisenberg, em 1927, foi de grande importância para o desenvolvimento da mecânica quântica. Constatou-se que devido à característica dual da partícula não seria possível mensurar simultaneamente e com a mesma precisão da constante de Planck a posição e o momento de corpos muito pequenos. Por isso, tratando-se de mecânica quântica, o mais correto é mensurar a probabilidade de se encontrar uma partícula em uma região do espaço.^{3, 4}

Munido dos conceitos inovadores sobre a mecânica quântica que surgiram nessa época, Erwin Schrödinger sugeriu descrever sistemas atômicos por meio de uma equação de autovalores, como mostra a equação 1.1.^{3, 4}

$$\hat{H}\Psi_{(\mathbf{x},t)} = E\Psi_{(\mathbf{x},t)} \quad (1.1)$$

A equação 1.1 é conhecida como equação de Schrödinger dependente do tempo, no qual o operador, $\hat{H}$, é aplicado a uma função de onda, $\Psi_{(\mathbf{x},t)}$, dependente das coordenadas espaciais e temporal do elétron, resultando em uma constante e a própria função de onda novamente. Sabe-se que sempre é possível converter a equação de Schrödinger dependente do tempo para a forma independente do tempo, e neste trabalho será abordado apenas da

forma independente do tempo, descrita pela equação 1.2:

$$\hat{H}\Psi_{(\mathbf{x})} = E\Psi_{(\mathbf{x})} \quad (1.2)$$

Um operador pode ser definido como uma regra matemática aplicada à uma função, nesse caso, uma fórmula que descreve uma propriedade da mecânica clássica deve ser reescrita segundo regras da mecânica quântica e então, aplicada à uma função. O Hamiltoniano é o operador comumente utilizado na equação de Schrödinger e descreve a energia total do sistema como a soma da energia cinética, a energia potencial e a energia de repulsão entre os elétrons, como mostra respectivamente na equação 1.3:^{3, 4}

$$\hat{H}_{\text{eletrônico}} = -\sum_i^n \frac{h^2}{8\pi^2 m_e} \Delta_i^2 - \sum_i^n \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_i^n \sum_{j>i}^n \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (1.3)$$

Ao solucionar a equação 1.2, utilizando um sistema de coordenadas polares para átomos monoelétrônicos, uma função de onda exata $\Psi_{(n,l,m)}$ é obtida, e esta contém todas as informações sobre o sistema estudado, mesmo que em si não possua significado físico. Entretanto, seu módulo ao quadrado expressa a densidade de probabilidade de se encontrar o elétron em uma dada região, conhecida por orbital.^{3, 4}

Em vias gerais, a função de onda monoelétrica pode ser descrita através de uma parte radial, $R_{(n,l)}(r)$, e uma parte angular, $Y_{(l,m)}(\theta, \varphi)$, onde n , l e m representam respectivamente os números quânticos principal, secundário e magnético, como é mostrado na equação 1.4.^{1, 3, 5}

$$\Psi_{(n,l,m)}(r, \theta, \varphi) = R_{(n,l)}(r)Y_{(l,m)}(\theta, \varphi) \quad (1.4)$$

A parte angular da função de onda, apresentada na equação 1.4, tem solução conhecida mediante o uso dos polinômios de Legendre, equação 1.5.^{1, 3, 5}

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} P_l^m(\cos\theta) \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{im\varphi} \quad (1.5)$$

A solução da parte radial da equação 1.4, envolve os polinômios associados de Laguerre, $(L_{n+l}^{2l+1}(r))$, e depende da solução da parte angular para solucioná-la, como mostra a equação 1.6:

$$R_{(n,l)}(r) = \left(\frac{r}{nr_0}\right)^l e^{(-\frac{r}{nr_0})} L_{n+l}^{2l+1}(r) \quad (1.6)$$

Entretanto, resolver a equação função 1.2 e encontrar um função de onda exata para sistemas com muitos elétrons é impossível. A dificuldade está em calcular as integrais multicêntricas provenientes da repulsão entre os elétrons descrita na equação abaixo:^{3, 5}

$$(\mu_A \nu_B | \lambda_C \sigma_D) = \int \int \phi_\mu^A(r_1) \phi_\nu^B(r_1) \frac{1}{r_{12}} \phi_\lambda^C(r_2) \phi_\sigma^D(r_2) dr_1 dr_2 \quad (1.7)$$

onde ϕ_μ^A é a função de onda centrada no núcleo A e assim sucessivamente para os núcleos B, C e D descritos nesse caso.

Para vencer esse obstáculo foi necessária a aplicação de aproximações tanto no modo de descrever a função de onda quanto no método matemático para resolvê-la. Como descrever o átomo multieletrônico com apenas uma função de onda exata se mostrou uma tarefa extremamente onerosa, imaginou-se utilizar um conjunto de várias funções aproximadas para descrever o ambiente atômico. Entretanto, o aumento do número de funções de onda proporciona um aumento o custo computacional. Para amenizar esse efeito, Roothaan sugeriu realizar uma combinação linear entre as funções de onda aproximadas, segundo a equação 1.8.^{3, 6}

$$\Phi = \sum_{i=1} c_i \chi_i \quad (1.8)$$

Na equação 1.8, as funções aproximadas χ_i descritas por uma parte angular (equação 1.5) e uma parte radial representada por funções tipo Slater (*Slater Type Function- STF's*) ou funções tipo Gaussianas (*Gaussian Type Function- GTF's*), com seus respectivos coeficientes c_i , formando os conjuntos de base.

1.2 Conjuntos de Base

Vendo ser possível a determinação de uma função de onda exata para átomo de Hidrogênio, ou Hidrogenoides, Slater sugeriu como alternativa à função de onda derivada da solução da equação de Schrödinger a aplicação de funções semelhantes às do átomo de Hidrogênio para descrever a parte radial das funções χ_i presentes na equação 1.8, formando um conjunto de base STF's, equação 1.9.

$$\Psi_{(r,\theta,\varphi)} = N r^{n-1} e^{-\zeta r} Y_{(\theta,\varphi)}^{l,m} \quad (1.9)$$

$$\zeta = \frac{Z - S}{n}$$

Na equação 1.9, N é um fator de normalização e o parâmetro ζ é descrito pela carga nuclear, Z, a constante de blindagem, S e o número quântico principal, n.

Analisando graficamente a função de onda atômica 1.9 (Distância (r) vs Função de onda), constata-se que há um pico (*cusp*) na origem do gráfico, na região próxima ao núcleo,

e conforme o elétron se distancia do núcleo (aumento do valor de r), há um decaimento exponencial da função à zero. Devido ao termo $e^{-\zeta r}$, as STF's se tornam excelentes para calcular propriedades físico-químicas, porém, o cálculo das integrais multicêntricas, exemplificada pela equação 1.7, ainda são custosas.^{7, 8}

Como alternativa para diminuir o custo computacional do cálculo das integrais multicêntricas e consequentemente facilitar os cálculos de propriedades moleculares, S. F. Boys indicou o uso de funções tipo gaussianas (*Gaussian-type function*– GTF's) para retratar a parte radial de χ_i dos conjuntos de base da equação 1.8, expressas na equação abaixo:⁹

$$\Psi_{(r,\theta,\varphi)} = Nr^{n-1}e^{-\alpha r^2}Y_{(\theta,\varphi)}^{l,m} \quad (1.10)$$

Na equação 1.10, N é a constante de normalização, n representa o número quântico principal e α é um parâmetro determinado variacionalmente.

As equações 1.9 e 1.10 são semelhantes exceto pelo termo exponencial, que no caso das GTF's, raio elevado ao quadrado ($e^{-\alpha r^2}$) confere um abaulamento no *cusp*, além de uma queda abrupta na região de valência. Essa é uma diferença importante, visto que reflete diretamente na descrição da região mais próxima e mais distante do núcleo, prejudicando-as. De modo que é necessário um maior número de funções para garantir a acurácia dos cálculos atômicos e moleculares com as GTF's.

O aumento do número de funções tipo GTF's para descrever os orbitais atômicos e moleculares pode ser um problema, uma vez que o tempo computacional aumenta exponencialmente ao aumentar a quantidade de funções. Entretanto, sabe-se que o produto de duas GTF's (G1 e G2) resulta em uma nova função (G1G2) centrada entre as funções originais, como mostra a figura 1.

A vantagem de tornar a resolução das integrais multicêntricas mais amigáveis, equação 1.7, fez com que muitos autores aplicassem as GTF's para descrever os conjuntos de base da literatura, apesar de necessitarem de um número maior de funções.⁹

Escrever diferentes funções de onda significa propor diferentes valores de α (expoentes) das equações 1.9 ou 1.10, é importante perceber que os valores de r e α descritos por essas equações são inversamente proporcionais, de forma que menores valores de α estão relacionados à regiões mais distante do núcleo (maior valor de r), também conhecida como a região de valência.

Se um conjunto de base fosse constituído por infinitas funções, descreveria exatamente o sistema atômico ou molecular e seria conhecido como conjunto de base completo. Contudo, isso é inviável visto que o aumento da quantidade de funções de onda acarreta em um drástico aumento no tempo computacional, impossibilitando o cálculo de forma

Figura 1: Produto entre funções Gaussianas (G_1 e G_2)

Fonte: Atkins, P. Friedman, R. Molecular quantum mechanics (2005)

prática.

Com a inviabilidade do uso de um conjunto de base completo, o procedimento padrão é realizar testes computacionais, principalmente de comparação de energia atômica, para determinar a quantidade ideal e quais serão as funções de onda que farão parte do conjunto de base que descreverá com acurácia as propriedades físico-químicas desejadas. Esse conjunto inicial é chamado de conjunto de primitivas.

O próximo procedimento é realizar a contração, ou seja, diminuir a quantidade de funções de onda calculadas através de combinação linear entre os expoentes do conjunto de primitivas. Quando todos os expoentes são combinados criando um conjunto de base com apenas uma função, é denominado de conjunto de base mínimo ou *Single-Zeta*, porém esse conjunto não prevê as propriedades apropriadamente.³

Para melhorar a descrição da região valência do átomo, alguns expoentes mais difusos do conjunto de base não são incorporados ao processo de contração. Em um conjunto de base denominada Duplo-Zeta (DZ), cada orbital é descrito por 2 funções de onda, uma função gerada após a contração e uma função primitiva não contraída. Seguindo este raciocínio, um conjunto de base Triplo-Zeta (TZ) usará 3 funções para descrever cada

orbital (uma função gerada após a contração e mais 2 funções mais difusas do conjunto de primitiva) e assim sucessivamente para conjuntos de base N-Zeta ($N = 4, 5, 6, \dots$).³

O método da contração segmentada é uma forma de realizar a contração das funções primitivas baseada na divisão do átomo em várias regiões, de modo que as funções sejam agrupadas de acordo com a necessidade de cada uma delas. Consequentemente, algumas funções serão requeridas em mais de uma região enquanto outras não participarão de nenhuma delas. Esse é um método custoso devido à complexidade de se determinar as regiões de contração, além da necessidade de utilizar um maior número de funções de onda para obter uma boa descrição das propriedades, devido a possibilidade de se repetir uma mesma função em diferentes regiões.^{10, 11}

Uma forma diferente de realizar o processo de contração é mediante ao método da contração geral, onde o átomo é dividido em uma região de valência, na qual as funções mais difusas permanecem não contraídas, enquanto todas as outras funções são combinadas linearmente para descrever a região mais interna. Entretanto, apenas combinar todos os expoentes pode gerar redundâncias no conjunto contraído, por isso os expoentes e coeficientes são submetidos a um processo de purificação de Davidson, onde alguns expoentes dos conjuntos de primitivas são retirados do conjunto contraído ao impor que seu coeficiente seja zero.^{10, 11}

Apenas a contração do conjunto de base não garante que esse descreverá adequadamente o ambiente molecular, por isso faz-se necessária a adição de expoentes de momento angular (l) maior que os já encontrados no conjunto de base inicial. Esse procedimento é denominado polarização e auxilia a modelar os orbitais não esféricos, a reproduzir estados excitados, ligações químicas, energias de dissociação, dentre outros. É possível citar dois métodos de polarização, o otimizado e a pinçada. O primeiro, um valor inicial de expoente é adicionado e em seguida otimizado, normalmente utilizando um métodos de alta acurácia como o *Configuration interaction*-CI, que será discutido a diante. O segundo, seleciona expoente do próprio conjunto de base com valor próximo a 1 para ser o primeiro expoente da polarização de cada um dos números quânticos secundários adicionados, os demais expoentes selecionados correspondem a aproximadamente metade do anterior, como mostra a figura 2.¹²

Figura 2: Esquema de polarização pinçada para o átomo de H

Fonte: Do autor (2021)

Até este momento, foram apresentados alguns conceitos básicos sobre a teoria envolvida no processo de obtenção dos conjuntos de base, como o porquê deve-se empregar mais de uma função de onda para a geração de um conjunto de base e quais os tipos de funções normalmente utilizadas (STF's ou GTF's), os processos de contração mais populares (segmentada ou geral) e o que são as funções de polarização e dois métodos mais comuns de seleciona-las (pinçado ou otimizado).

A seguir, será apresentado o método para seleção dos expoentes e coeficientes adotado neste trabalho, o Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock Polinomial e algumas outras variantes, além de outros conjuntos de base mais recorrentes na literatura.

1.3 Desenvolvimento dos Conjuntos de Base

1.3.1 Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock - MCG-HF

J. J. Griffin, J. A. Wheller e D. L. Hill estudaram formas de descrever o movimento coletivo de partículas individuais analogamente à descrição do movimento de moléculas, como propuseram Bohr e Mottelson e outros pesquisadores. Para muitas propriedades físicas

não era necessário revisitar o problema de muitos corpos, entretanto, para propriedades com frequência da vibração coletiva, partindo de uma força inicial entre os núcleos, notou-se a necessidade de escrever uma função de onda que representasse o sistema. Então, o Método da Coordenada Geradora (MCG) foi proposto com o objetivo de realizar essa descrição de forma variacional.^{13, 14}

Para a construção da função de onda tentativa, o potencial real sentido pelos núcleos descrito no Hamiltoniano foi substituído por um potencial fictício, caracterizado por um parâmetro de forma (α). A equação de onda foi solucionada para partículas individuais se movendo nesse potencial e só pode ser completamente e unicamente determinada uma vez que se conheça o potencial como uma função de α . Para descrever um sistema com muitas partículas, como mostra a equação abaixo, foi construído um determinante utilizando as funções de onda das partículas individuais:¹³

$$\Psi_{(X_1, \dots, X_N)} = \int \varphi_n(X; \alpha) f(\alpha) d\alpha \quad (1.11)$$

Em 1.11, α é a coordenada geradora visto que é utilizada para gerar a função de onda do sistema e $f(\alpha)$ é o gerador de função de onda. Então, a determinação da função de onda dependerá da escolha do gerador de função de onda como mostrado a seguir:¹³

$$\delta E = 0 \text{ e } \frac{\delta E}{\delta f(\alpha)} = 0 \quad (1.12)$$

Então, ao aplicar a equação 1.11 em um sistema ortonormalizado para a determinação da menor energia possível, conforme a equação 1.12, a equação de onda geradora é obtida:¹³

$$\int [K(\alpha, \beta) - EI(\alpha, \beta)] f(\beta) d\beta = 0 \quad (1.13)$$

onde K representa a energia dos núcleos e I é a integral de recobrimento.

Entretanto, a solução do MCG não é trivial sendo raros os exemplos de soluções analíticas, tornando-se comum o uso de métodos numéricos. Além disso, algumas aproximações aplicadas para solucionar as equações desse método ofuscam o seu poder computacional.^{13, 15} Neste contexto, J. R. Mohallem propôs que para tornar o MCG mais robusto, a discretização deveria ser aplicada visando melhorar a integração numérica das equações de Griffin, Hill e Wheeler (GHW), ao invés de escolher pontos de discretização com critério variacional.^{16, 15}

Como consequência, foi criado o Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock, MCG-HF, uma modificação do MCG, no intuito de promover procura por conjuntos de base mais compactos, sem prejudicar a precisão e com equações mais simples de serem solucionadas. Esse método pode ser utilizado para gerar tanto STF's quanto GTF's,

onde todos os núcleos são avaliados analiticamente e as equações de GHW aplicadas ao Hartree-Fock (HF), GHW-HF, são solucionadas através de interações.¹⁵

A função de onda do MCG-HF é a mesma vista na equação 1.11, porém nesse contexto o $\varphi_n(X; \alpha)$ pode ser descrito por STF's ou por GTF's e $f(\alpha)$ é uma função peso desconhecida. Dessa forma, ao minimizar a energia total em relação a $f(\alpha)$, como a equação 1.12, encontra-se a equação de GHW-HF:

$$\int [F(\alpha, \beta) - \varepsilon_k S(\alpha, \beta) d\beta] = 0 \text{ sendo } k = 1, 2, 3, \dots, n \quad (1.14)$$

O ε_k são os autovalores dos orbitais, $F(\alpha, \beta)$ são os núcleos de Fock e o $S(\alpha, \beta)$ descreve o recobrimento. As formas completas dos dois últimos termos foram descritos respectivamente abaixo:

$$F(\alpha, \beta) = h(\alpha, \beta) + \sum_j^N [2J_j(\alpha, \beta) - K_j(\alpha, \beta)] \quad (1.15)$$

$$S(\alpha, \beta) = \langle \phi_k(1, \alpha) | \phi_k(1, \beta) \rangle \quad (1.16)$$

O núcleo de Fock é descrito pela energia cinética de cada elétron, $h(\alpha, \beta)$, e as interações coulombicas de dois elétrons (integrais de Coulomb, $J_j(\alpha, \beta)$, e de troca, $K_j(\alpha, \beta)$) onde as formas explícitas das expressões são apresentadas respectivamente:

$$h(\alpha, \beta) = \langle \phi_k(1, \alpha) | h(1) | \phi_k(1, \beta) \rangle \quad (1.17)$$

$$J_j(\alpha, \beta) = \iint V(\alpha, \xi; \gamma, \beta) f_j^*(\xi) f_j(\gamma) d\xi d\gamma \quad (1.18)$$

$$K_j(\alpha, \beta) = \iint V(\alpha, \xi; \beta, \gamma) f_j^*(\xi) f_j(\gamma) d\xi d\gamma \quad (1.19)$$

onde

$$V(\alpha, \xi; \gamma, \beta) = \left\langle \phi_k(1, \alpha) \phi_j(2, \xi) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \phi_j(2, \xi) \phi_k(1, \alpha) \right\rangle \quad (1.20)$$

$$V(\alpha, \xi; \beta, \gamma) = \left\langle \phi_k(1, \alpha) \phi_j(2, \xi) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \phi_k(2, \xi) \phi_j(1, \alpha) \right\rangle \quad (1.21)$$

A equação 1.14 é solucionada por meio de um procedimento iterativo, tendo como ponto de partida uma função peso inicial e a integração numérica é realizada com o objetivo de evitar a otimização de parâmetros não lineares de α . Uma forma direta para realizar esse processo é escolher uma malha com N pontos igualmente espaçados no espaço α . Entretanto, ao aplicar essa técnica utilizando GTF's, a função peso fica espalhada,

necessitando de uma forma mais sofisticada de descrever os incrementos $\Delta\alpha$ e α . Então, foi proposto uma substituição de variáveis:¹⁵

$$\frac{\log\alpha}{A} \rightarrow \alpha, A > 1 \quad (1.22)$$

As soluções dessas equações proporcionam a energia do sistema e novas funções peso, que são utilizadas no processo iterativo para gerar novas funções peso, e esse procedimento é repetido até que a convergência seja atingida.¹⁵

O Conjunto de Base Universal (UGBS) é um exemplo de conjunto de base gerado através do MCG-HF e foi utilizado para cálculos atômicos e moleculares.^{17, 18} Entretanto, as equações GHW-HF contidas no MCG-HF apresentavam soluções analíticas para o caso de átomos monoelétrônicos, uma vez que com aumento do número de elétrons as integrais tornam-se extremamente complexas, além do desafio de gerar conjuntos de base utilizando GTF's.^{16, 19}

Neste contexto, F. E. Jorge e E. V. R. Castro propuseram flexibilizar a malha de pontos, tornando-a não igualmente espaçada ao utilizar duas ou três sequências aritméticas para cada simetria para gerar os conjuntos de base, ao invés de apenas uma, como no método visto anteriormente.¹⁵ Esse método é conhecido como Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock Melhorada (*Improved Generator Coordinate Hartree-Fock Method*, IMCG-HF).^{17, 18}

A função utilizada para descrever o sistema é a mesma descrita na equação 1.11 e a equação que descreve a energia total é a mesma já citada anteriormente, 1.14. Entretanto, o IMCG-HF apresenta uma nova forma realizar a substituição de variável através da equação 1.23:

$$\Omega = \frac{\ln \alpha}{A}, A > 1 \quad (1.23)$$

onde A é o mesmo parâmetro escalar determinado numericamente proposto anteriormente.

O novo espaço da coordenada geradora Ω é discretizado para cada simetria (s, p, d e f) em uma malha igualmente espaçada.¹⁸

$$\Omega_k = \Omega_{min} + (k - 1)\Delta\Omega, k = 1, 2, 3, \dots, N \quad (1.24)$$

Na equação 1.24, N corresponde ao número de pontos de discretização que definem o tamanho do conjunto de base, Ω_{min} é o ponto inicial e $\Delta\Omega$ são os incrementos.

Para obter uma malha que não seja igualmente espaçada, a equação 1.24 é reescrita como uma sequência aritmética independentes para cada simetria, equação 1.25 e 1.26:

- Duas sequências:

$$\Omega_k = \begin{cases} \Omega_{min} + (k-1)\Delta\Omega & k = 1, \dots, M \\ \Omega'_{min} + (k-1)\Delta\Omega' & k = M+1, \dots, N \end{cases} \quad (1.25)$$

- Três sequências:

$$\Omega_k = \begin{cases} \Omega_{min} + (k-1)\Delta\Omega & k = 1, \dots, j \\ \Omega'_{min} + (k-1)\Delta\Omega' & k = j+1, \dots, M \\ \Omega''_{min} + (k-1)\Delta\Omega'' & k = M+1, \dots, N \end{cases} \quad (1.26)$$

Esse método flexibilizou as malhas, por não ser igualmente espaçada, porém houve um aumento na quantidade de parâmetros a serem avaliados.

Visando otimizar ainda mais o processo de geração de conjuntos de base, R. C. Barbosa e A. B. F. da Silva propuseram uma nova forma de discretizar as WHG-HF, reescrevendo a equação 1.24 como sendo um polinômio.¹⁹

$$\Omega_k^w = \frac{\ln \alpha}{A} = \Omega_{min}^w + \Delta\Omega_1^w(k-1) + \Delta\Omega_2^w(k-1)^2 + \dots + \Delta\Omega_q^w(k-1)^q$$

sendo $k = 1, 2, \dots, N$ e $w = s, p, d, f, \dots$ (1.27)

ou ainda, escrevendo a equação 1.27 em relação aos expoentes:

$$\alpha_k^{(w)} = e^{A\Omega_{min}^w + \Delta\Omega_1^w(k-1) + \Delta\Omega_2^w(k-1)^2 + \dots + \Delta\Omega_q^w(k-1)^q} \quad (1.28)$$

Esse método é conhecido como Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock Polinomial (pMCG-HF) e com apenas um polinômio por simetria é capaz de gerar uma malha que seja não-igualmente espaçada, permitindo que os expoentes escolhidos para compor o conjunto de base sejam mais flexíveis, mesmo utilizando GTF's para descrever o sistema. Os incrementos são encontrados de forma variacional e dependem do grau do polinômio (q) e através de estudos empíricos foi constatado que o melhor desempenho é obtido quando o polinômio é truncado ao terceiro ou quarto grau e A é um parâmetro numérico que assume o valor 6 para todos os cálculos.^{19, 20}

1.3.2 Outros Conjunto de Base

A incorporação das teorias da mecânica quântica aplicadas à sistemas químicos em computadores iniciou-se no final do século XIX. No entanto, esses eram tanto quanto rudimentares, principalmente comparados com os utilizados atualmente, fazendo com que a escolha dos métodos utilizados para a realização dos cálculos e o conjunto de base selecionado para efetuá-los fosse vital para a qualidade e tempo de duração do estudo.

Tradicionalmente os conjuntos de base eram desenvolvidos através de duas metodologias principais, a primeira gera conjuntos de base ditos "igualmente temperados" (*even-tempered*) e a segunda os "bem temperados" (*well-tempered*).^{21, 22} Assim como o pMCG-HF, essas são formas de se obter os expoentes que irão compor os conjuntos de base e podem ser calculadas utilizando STF's ou GTF's.

A equação geral para determinar os expoentes dos conjuntos de base tanto igualmente temperadas quanto as bem temperadas pode ser descrita como:

$$\phi_{k,l,m} = N_l(\zeta_k) e^{\zeta_k r^p} r^{n-1} Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (1.29)$$

A equação 1.29 é uma forma generalizada das equações 1.9 e 1.10 apresentadas anteriormente e como já visto, $N_l(\zeta_k)$ é a constante de normalização e p será igual a 1 para STF's e 2 para GTF's.^{7, 21}

Os conjuntos de base igualmente temperados e bem temperados se diferem quanto a forma de escrever o fator ζ_k impactando em toda as características de cada um desses conjuntos de bases. A equação 1.30 representa as funções tipo igualmente temperadas onde α e β são parâmetros variacionais e k é o número de expoentes para cada simetria. A quantidade reduzida de parâmetros variacionais a serem otimizados (α e β) é uma das principais vantagens de utilizar essa função.^{7, 21}

$$\zeta_k = \alpha \beta^{k-1} \quad (1.30)$$

Já a funções bem temperadas descrevem o termo ζ_k como mostrado na equação 1.31 a seguir:

$$\zeta_k = \alpha \beta^{k-1} \left[1 + \gamma \left(\frac{\alpha}{k} \right)^\delta \right] \quad (1.31)$$

Nesse caso, α , β , γ e δ serão os parâmetros variacionais a serem otimizados, onde os parâmetros γ e δ são adicionados no intuito de controlar eventuais desvios, principalmente nos últimos termos da progressão da série. Apesar do aumento do número de parâmetros, os cálculos desenvolvidos na época apontaram que os conjuntos de base bem temperados apresentam menores problemas de dependência linear, além de convergirem para a menor energia mais rapidamente.^{7, 21} A figura 3, ilustra a relação entre os expoentes dos conjuntos de base obtidos por funções tipo bem temperadas, igualmente temperadas e otimizadas independentemente.²¹

Figura 3: Relação entre os expoentes escolhidos pelas funções igualmente temperadas e bem temperadas

Fonte: Chem.Rev.1988, 86, 661-696

Um conjunto de base acurado com um grande número de expoentes seria mais flexível e se aproximariam de um conjunto de base completo, portanto, a otimização dos parâmetros se tornariam menos relevantes. Tendo isso em mente, D. M. Silver e S. Wilson propuseram que se houvesse um conjunto de base grande o suficiente, esse poderia ser utilizado para uma grande quantidade de átomos, formando um conjunto de base "universal" (*Universal Basis Sets - UBS*).^{22, 23, 24}

Além do conjunto de base "universal" de Silver e Wilson, outros também foram propostos como F. E. Jorge *et al.* utilizando o MCG-HF desenvolvidos tanto para átomos neutros quanto para íons e átomos das família dos lantanídeos e actenídeos (Cério ao Lantânio)^{25, 18, 26}, M. Giordan *et al.* propuseram um modelo de conjunto de base "universal" para ser utilizado em cálculos tipo pseudo-potencial²⁷ e ainda conjunto de base "universal" com correção relativística proposto por A. B.F. Da Silva *et. al.*²⁸, entre outros. Por selecionar uma grande quantidade de expoentes para que fosse possível descrever muitos átomos com apenas um conjunto de base, o conjunto de base "universal" se tornou exageradamente grande para ser aplicados em cálculos de átomos pequenos e muito pequeno para átomos grandes.

H. Partridge desenvolveu conjuntos de base não contraídos otimizados especificamente para cada átomo da tabela periódica utilizando GTF's para descrever as funções de onda. Para tanto, valores de energia foram gerados através de cálculos Hartree-Fock Restrito por um processo iterativo, no qual as matrizes foram avaliadas numericamente

usando gradientes avaliados analiticamente e os conjuntos de base foram otimizados até que a energia fosse constante, com erro de 1.10^{-8} . Foram realizados diversos conjuntos de bases com quantidades de expoentes diferentes e diferentes formas de contração.^{29, 30}

Os conjuntos de base desenvolvidos por J. A. Pople *et al.* estão entre os mais aplicados na literatura principalmente devido ao seu tamanho reduzido, permitindo a realização de cálculos de moléculas maiores com menor tempo computacional. Esses foram desenvolvidos utilizando o método da contração segmentada, onde quantidades diferentes de expoentes são contraídos dependendo da região do átomo. O nome do conjunto de base mostra como esses foram construídos, um exemplo é o conjunto 4-31G, no qual a região interna é descrita por uma combinação linear de 4 funções e a região de valência foi dividida em duas partes; uma descrita pela combinação linear de 3 funções e outra com apenas 1 função, todas GTF's. Posteriormente, foram realizados outros conjuntos de base maiores com funções de polarização, difusas e etc.^{31, 32, 33, 34}

Os conjuntos de base de T. H. Dunning Jr., conhecidos como *Correlation-Consistent Basis Sets - cc-pVXZ*, também são amplamente utilizados, sendo associados a resultados de alta precisão e alto custo computacional, especialmente para os conjuntos mais extensos.

Esses conjuntos de base foram desenvolvidos para cada átomo, nos quais os expoentes que descrevem as funções inerentes ao átomo (ex.: para o átomo de oxigênio, funções tipo *s* e *p*) foram gerados pela aplicação de GTF's à equação que descreve conjuntos de base igualmente temperados (equação 1.30) e por cálculos HF atômicos. Já as funções de polarização (ex.: para o átomo de oxigênio, funções tipo *d*, *f* e *g* ...) foram utilizadas funções de onda tipo campo autoconsistente multi-configuracional (*Multiconfiguration Self-Consistent-Field - MCSCF*), ou seja, funções de onda descritas como uma combinação linear de determinantes de Slater, calculado pelo método interação de configurações (*Configuration Interaction - CI*). Quanto ao processo de contração, T. H. Dunning Jr., optou por utilizar o método da contração geral.^{35, 10, 36}

Um exemplo de conjunto de base desenvolvido mais recentemente são os conjuntos de base polarização consistente (*polarization consistent basis sets - pc*), proposto por F. Jensen, com o objetivo de analisar a importância das funções de polarização, bem como gerar sequências hierárquicas de conjuntos de base para extrapolação para o limite HF e DF.

Os expoentes desse conjunto de base foram gerados a partir de um método de análise de matricial semelhante ao usado por H. Partridge. Nos casos de átomos que tem a camada aberta, foi aplicado o método ROHF para realizar os cálculos e todas as energias obtidas foram comparadas com o valor estipulado pelo método HF numérico. Como já mencionado anteriormente, a polarização é a adição de funções com número quântico secundário maior que aqueles descritos pelo átomo, e são fundamentais para descrever a distorção da nuvem eletrônica sofrida quando o átomo se liga a outros para a formação

de moléculas. Sabendo disso, F. Jensen, utilizou o ambiente molecular para encontrar as funções de polarização do seu conjunto de base, *pc-n*, porém para evitar que esse conjunto fosse otimizado apenas para uma molécula específica, ele selecionou moléculas diatômicas homonucleares.³⁷

1.4 Métodos para Cálculos Moleculares

Como já mostrado anteriormente, não é possível determinar a função de onda exata de átomos multieletrônicos utilizando a equação de Schrödinger devido a dificuldade de solucionar as integrais multicêntricas geradas, representadas pela equação 1.7. Portanto, houve a necessidade de estudar, além de diferentes formas de geração conjuntos de base, outros métodos computacionais para realizar cálculos envolvendo muitos elétrons. Os métodos utilizados podem ser separados em 3 grupos distintos:

- *Ab initio*: Resolve as integrais de forma analítica ou numérica, utilizando a menor quantidade de aproximações matemáticas possível e por isso, tem um alto custo computacional;
- Semi-empírico: Utiliza dados experimentais para aproximar o valor de algumas etapas mais desafiadoras do cálculo, diminuindo o tempo computacional;
- Mecânica Molecular: Faz uso da mecânica clássica para realizar algumas aproximações, aplicado principalmente em sistemas muito grandes como simulação de proteínas e enzimas.

A recomendação de uso de cada um desses métodos irá depender do sistema a ser analisado, os cálculos tipo *Ab initio* são extremamente precisos, porém absurdamente custosos, podendo ser completamente inviável em análises de moléculas ou sistemas grandes, como estudos de interação intermoleculares e sítio ativos ou para cálculos em meio aquoso. A escolha do conjunto de base e do método computacional a ser utilizado é crucial para obter resultados acurados com o menor tempo computacional possível.

A seguir, serão apresentados alguns dos métodos computacionais mais utilizados na literatura e também aplicados neste trabalho, como Hartree-Fock (HF) e variações, Teoria da Perturbação - Møller-Plesset (MP), Interação de Configurações (*Configuration Interaction*- CI), Teoria dos Pares Acoplados (*Coupled Cluster*- CC) e Teoria do Funcional da Densidade (*Density Functional Theory*- DFT) e alguns funcionais.

1.4.1 Hartree-Fock (HF)

Quando um método é dito variacional é possível garantir que a energia aproximada de uma função de onda aproximada, ortonormalizada e bem-comportada, encontrada após o cálculo será sempre maior ou igual à energia real do sistema:^{2, 3}

$$E_1 \leq \langle \varphi^* | \hat{H} | \varphi \rangle \quad (1.32)$$

Essa é uma característica interessante, pois garante que a energia obtida por metodologias variacionais não irá superestimar os valores de energia real do sistema, ou

seja, mesmo que seja impossível determinar a energia real dos átomos multieletrônicos, se o método for variacional, é possível garantir que quanto menor a energia obtida mais próximo estará da energia real. Vale ressaltar que a energia aproximada converge mais rapidamente para a energia real do que a função de onda aproximada converge para a função de onda real.^{2, 3}

O método Hartree-Fock (HF) se propõe a solucionar a equação de Schrödinger através do método do campo autoconsistente, *Self-Consistent Field*- SCF. Essa é uma metodologia iterativa em que uma função de onda inicial é proposta e a partir dela as equações são resolvidas variacionalmente até encontrar uma nova função e uma nova energia correspondente à essa. A nova função obtida será utilizada como função inicial e esse ciclo é repetido até que a convergência dos valores de energia seja alcançada.^{2, 3}

As funções de onda que descrevem partículas como os elétrons (*spin* fracionados) devem ser anti-simétrica, ou seja, sempre que houver trocas entre elétrons deve haver uma troca de sinal dessas funções. Para garantir essa característica, Slater propôs descrever as funções de onda de um sistema com n elétrons, $\Psi_{(r_1 r_2, \dots, r_n)}$, por meio de um determinante, denominado determinante de Slater:^{2, 3}

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} u_1(1) & u_2(1) & \dots & u_n(1) \\ u_1(2) & u_2(2) & \dots & u_n(2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_1(n) & u_2(n) & \dots & u_n(n) \end{vmatrix} \quad (1.33)$$

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:

$$u(n) = \psi(n) \alpha(n) \text{ ou } \bar{u}(n) = \psi(n) \beta(n) \quad (1.34)$$

As interações eletrônicas retratadas pelo operador Hamiltoniano aplicado ao método HF são descritas usando a aproximação do campo médio que transforma um problema de interação de muitos corpos em vários problemas de um único corpo de solução mais amigável. Assim sendo, a equação a seguir mostra o operador Hamiltoniano HF, em unidades atômicas:^{2, 3}

$$\hat{H} = - \sum_i^n \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_a^m \frac{1}{2M_a} \nabla_a^2 - \sum_i^n \sum_a^m \frac{Z_a}{r_{ia}} + \sum_i^n \sum_{j>i}^n \frac{1}{r_{ij}} + \sum_a^m \sum_{b>a}^m \frac{Z_a Z_b}{R_{ab}} \quad (1.35)$$

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 relacionados, respectivamente,

à energia cinética dos elétrons e dos núcleos, o terceiro termo refere-se à atração coulômbica entre elétrons e núcleos e os últimos dois termos representam a repulsão elétron-elétron e núcleo-núcleo, nessa ordem.^{2, 3}

Como já descrito acima, a equação 1.35 calcula as relações envolvendo os elétrons e os núcleos. Contudo, é possível observar que devido à grande diferença entre a massa do elétron (m_e) e a massa do núcleo (m_n), sendo $m_e \ll m_n$, os núcleos se movem muito lentamente quando comparado com a velocidade dos elétrons, 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 aplicada para descrever o Hamiltoniano utilizado no método HF:^{2, 3}

$$\hat{H}_{el} = - \sum_i^n \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_i^n \sum_a^m \frac{Z_a}{r_{ia}} + \sum_i^n \sum_{j>i}^n \frac{1}{r_{ij}} \quad (1.36)$$

É importante observar que por mais que o determinante 1.33 considere os momentos de *spin up* ou *down*, o operador Hamiltoniano utilizado para solucionar a equação 1.36, não inclui termos que contemplem as correções devido a velocidade do movimento dos elétrons, fazendo com que esse Hamiltoniano seja completamente não relativístico.

As equações apresentadas acima consideram apenas sistemas com elétrons emparelhados, ou seja, cada orbital está totalmente preenchido com um par de elétrons que são representados com a mesma parte espacial da função *spin*-orbital, diferenciando apenas pela parte referente ao *spin*. Esse método é uma derivação do HF conhecido como Hartree-Fock Restrito (*Restricted Hartree-Fock*- RHF).

Entretanto, isso não se aplica para todos os casos, um exemplo é o átomo de C^6 ($1s^2, 2s^2$ e $2p^2$), existem duas possibilidades para organizar os elétrons no orbital $2p^2$, a primeira considerando que cada elétron está em um orbital tipo p ($2p_x^1, 2p_y^1$ e $2p_z^0$) e a segunda, considerando que os dois elétrons estão emparelhados em um mesmo orbital tipo p ($2p_x^2, 2p_y^0$ e $2p_z^0$), sabe-se que no estado fundamental a primeira distribuição é preferível, todavia o método RHF considera apenas as funções *spin*-orbitais de elétrons emparelhados, ou seja, o segundo caso descrito acima.

Existem ainda outras duas variações do método HF, o Hartree-Fock Camada-Aberta Restrito (*Restricted open-shell Hartree-Fock*- ROHF) que distribui os elétrons nos orbitais buscando emparelhá-los sempre que possível, permitindo que o elétron fique desemparelhado apenas em último caso e o Hartree-Fock Irrestrito (*Unrestricted Hartree-Fock*- UHF) que sempre representa os elétrons de forma desemparelhada, criando funções espaciais diferentes para cada um deles. A figura 4 apresenta de forma esquemática a diferença entre os métodos HF.

Figura 4: Esquema diferenças entre RHF, ROHF e UHF

Fonte: Do autor (2021)

Os métodos apresentados até agora resolvem as equações de forma analítica e sua acurácia depende também da escolha do conjunto de base utilizado. Entretanto, nos anos 60, os pesquisadores se empenharam para calcular o HF através de métodos de aproximações numéricas que apresentavam a grande vantagem de não depender dos conjuntos de base para alcançar níveis de acurácia desejáveis, tornando-os mais rápidos, principalmente ao considerar o átomo multieletrons, o Hartree-Fock Numérico (*Numerical Hartree-Fock-NHF*). Vários métodos numéricos foram aplicados para solucionar as equações do método HF, porém, segundo Charlotte Froese, um bom método NHF deve ter as seguintes características:³⁸

- Deve ser totalmente automático;
- Flexível e ainda requerer apenas o mínimo de informação do usuário;
- Ser eficiente e acurado.

Um dos pesquisadores que obteve maior sucesso em estudar átomos neutros, catiônicos e aniônicos, ambos monovalentes, foi T. Koga *et al.* visto que conseguiram prever resultados de energia, potencial de ionização e ainda afinidade eletrônica para uma grande quantidade de átomos com alta acurácia. Para isso, os parâmetros de integração numérica foram ajustados usando um estudo de *benchmark* dos átomos de He-Xe, e por isso, seus resultados serão utilizados para comparação entre as energias atômicas na fase de seleção do conjunto de primitivas.³⁹

1.4.2 Teoria da Perturbação - Møller-Plesset

A Teoria da perturbação é mais uma abordagem para solucionar o cálculo de átomos multieletrônicos ou moléculas. Nesse caso, o Hamiltoniano total é definido como a soma de um Hamiltoniano equivalente ao observado na solução da equação de Schrödinger, chamado

sem perturbação ($\hat{H}^0$), e outro que considera a perturbação ($\hat{H}'$), como apresentado na equação 1.37.⁴

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}' \quad (1.37)$$

O índice "0" indica que o Hamiltoniano descreve a parte do sistema sem perturbação e não que esse está no estado fundamental. O objetivo dessa teoria é relacionar as autofunções e autovalores desconhecidos do sistema com perturbação com aquelas do sistema sem perturbação, para tanto, a equação 1.38 pode ser reescrita acrescentando um fator λ :³

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \lambda \hat{H}' \quad (1.38)$$

Quanto o fator λ é igual a zero, então considera-se que esse Hamiltoniano está completamente sem perturbação caso contrário, $\lambda = 1$, o sistema está completamente sob perturbação. A função de onda e consequentemente a energia total, também deverão ser reescritas considerando o fator de perturbação λ , equação 1.39.^{3, 2, 4}

$$\begin{aligned} \psi &= \psi^0 + \lambda \psi^1 + \lambda^2 \psi^2 + \dots \\ E &= E^0 + \lambda E^1 + \lambda^2 E^2 + \dots \end{aligned} \quad (1.39)$$

Reescrevendo a equação de Schrödinger (equação 1.2) substituindo as equações 1.38 e 1.39 nos respectivos termos:

$$\begin{aligned} (\hat{H}^0 + \lambda \hat{H}')(\psi^0 + \lambda \psi^1 + \lambda^2 \psi^2 + \dots) &= (E^0 + \lambda E^1 + \lambda^2 E^2 + \dots) \\ &\quad x(\psi^0 + \lambda \psi^1 + \lambda^2 \psi^2 + \dots) \end{aligned} \quad (1.40)$$

Calcular todos os termos da expansão observada na equação 1.40 pode ser uma árdua tarefa, entretanto esse não é o procedimento de praxe. Rotineiramente, a equação 1.40 é truncada nos primeiros termos na série, indicando assim a ordem de perturbação que está sendo considerado. Se o truncamento ocorre no segundo termo, λ^2 , (considerando $\psi^0 + \lambda \psi^1 + \lambda^2 \psi^2$), então é dito que o sistema considera apenas perturbações de segunda ordem e assim sucessivamente. Quando o sistema é truncado no termo de ordem zero, ψ^0 , ele é chamado de perturbação de primeira ordem e é equivalente ao próprio HF.²

Na figura 5 é apresentado um esquema da relação entre a energia do cálculo da perturbação de primeira ordem e energia exata do sistema. Nesse caso, ao considerar o sistema totalmente sem perturbação, $\lambda = 0$, observa-se que a energia E^0 é menor que a energia exata. Entretanto, ao considerar o sistema totalmente com perturbação, $\lambda = 1$, a

energia total, $E^0 + \lambda E^1$, é superestimada, esse erro tem a tendência de diminuir ao incluir mais termos da expansão.

Figura 5: Energia de perturbação de primeira ordem e a energia exata do sistema

Fonte: Mortimer, Robert G - *Physical Chemistry*, p. 800, 3ª ed

Métodos perturbativos não são variacionais o que significa que a energia obtida por esses métodos pode ser menor que a energia real do sistema. Entretanto, são consistentes com o tamanho, ou seja, a energia calculada varia linearmente com o número de partículas.⁴⁰

1.4.3 Interação de Configuração - CI

Por mais que o HF seja um método pioneiro e revolucionário, observa-se que há uma diferença significativa entre a energia HF calculada com o conjunto de base mais completo possível, E_{HF} , e a energia não relativística exata do sistema, ε_{exato} . Essa diferença é chamada de energia de correlação, E_{corr} , e o método interação de configuração (*Configuration Interaction*- CI) se propõe a descrevê-la.⁴⁰

$$E_{corr} = \varepsilon_{exato} - E_{HF} \quad (1.41)$$

Para tal fim, o método CI considera função de onda exata como sendo uma combinação linear das funções tentativas dos N-elétrons avaliados variacionalmente.^{3, 40}

$$\begin{aligned} |\phi\rangle = & c_0|\psi_0\rangle + \sum_r \sum_a c_a^r |\psi_a^r\rangle + \sum_r \sum_{s>r} \sum_a \sum_{b>a} c_{ab}^{rs} |\psi_{ab}^{rs}\rangle + \\ & + \sum_r \sum_{s>r} \sum_{t>s} \sum_a \sum_{b>a} \sum_{c>b} c_{abc}^{rst} |\psi_{abc}^{rst}\rangle + \dots \end{aligned} \quad (1.42)$$

Os termos $|\psi\rangle$ representam os determinantes de Slater para cada configuração arranjo eletrônico possível, onde o termo $c_0|\psi_0\rangle$ representa o estado fundamental descrito pelo HF, o $a^r|\psi_a^r\rangle$ exprime o coeficiente da combinação linear e o determinante que descreve a excitação simples de um elétron do orbital $a \rightarrow r$ respectivamente, as excitações duplas são descritas pelo determinante $|\psi_{ab}^{rs}\rangle$ e assim sucessivamente, ou seja, a equação 1.42 corresponde à função de onda do método CI completo que faz uma combinação linear de todos os determinantes possíveis. A quantidade de determinantes em um cálculo CI completo pode ser expresso por:

$$\frac{2k!}{(2k-n)!n!} \quad (1.43)$$

sendo k o número de funções utilizadas e n o número de elétrons.^{3, 40} A figura 6 apresenta uma estimativa do aumento da quantidade de determinantes a partir da equação 1.43 considerando $k = 10$. Verifica-se que mesmo com um número pequeno de elétrons ($n = 6$) a quantidade de determinantes avaliados é impraticável (38760). Além disso, a tendência é aumentar o número de funções (k) utilizadas ao aumentar n , ou seja, esse gráfico possui característica exponencial, exemplo se $n = 20$ e $k = 24$ esta quantidade de determinante alcança $1,67 \cdot 10^{13}$.

Figura 6: Aumento da quantidade de determinantes avaliados no método CI completo

Fonte: Do autor (2021)

As energias exatas do sistema serão obtidas, para o estado fundamental e para todos os estados excitados, caso $|\phi\rangle$ corresponda à função exata. A equação 1.42 pode ser reescrita de forma simplificada pela equação abaixo.^{3, 40}

$$|\phi\rangle = \sum_{j=1}^N c_j |\psi_j\rangle \quad (1.44)$$

É possível escrever a equação da energia para sistemas ortonormalizados como:

$$E_i = \frac{\langle \phi_i | \hat{H} | \phi_i \rangle}{\langle \phi_i | \phi_i \rangle} \quad (1.45)$$

Substituindo a equação 1.44 em 1.45 e rearranjando a equação:

$$\sum_i c_i^* \sum_j c_j \langle \psi_i | \hat{H} | \psi_j \rangle - E \left(\sum_i c_i^* \sum_j c_j \langle \psi_i | \psi_j \rangle - 1 \right) = E \quad (1.46)$$

Na equação 1.46, o termo $\langle \psi_i | \psi_j \rangle$ corresponde ao delta de Kronecker (δ_{ij}) que considera apenas as equações que $i = j$ ($\delta_{ij} = 1$), pois para casos que $i \neq j \Rightarrow \delta_{ij} = 0$, então:

$$\sum_i \sum_j c_i^* c_j \langle \psi_i | \hat{H} | \psi_j \rangle - E \left(\sum_i c_i^* c_i - 1 \right) = E \quad (1.47)$$

A equação 1.47 deve ser tratada variacionalmente de forma a minimizar o valor de energia, ou seja, $\delta E = 0$. Entretanto, realizar o CI completo é impraticável para sistemas de muitos elétrons, haja visto a equação 1.43 que mostra o grande e rápido aumento da quantidade de determinantes a serem avaliados. Existem algumas formas de diminuir essa quantidade fazendo o método CI ser praticável, como reduzir o número de excitações a serem consideradas no cálculo ao truncar as equações no termo que descreve apenas a excitação simples (CIS), apenas a excitação dupla (CID) ou até mesmo ambas, excitação simples e duplas (CISD). É interessante observar que para átomos ou moléculas com 2 elétrons o método CISD é equivalente ao CI completo. Além disso, escolher uma boa função de partida, $|\psi_0\rangle$, é essencial, para isso é de praxe utilizar a função HF.

O método CI completo é consistente com o tamanho e variacional, porém computacionalmente impraticável, suas variações (CIS, CID, CISD e etc.) são variacionais, porém não são consistentes com o tamanho.

1.4.4 Teoria dos Pares Acoplados - CC

A teoria dos pares acoplados (*coupled-cluster-CC*) é um método *ab initio* com objetivo de corrigir E_{corr} e é associado a resultados com alta precisão e com um aumento expressivo do custo computacional, podendo ser até computacionalmente inviável. As funções de onda desse método pode ser descritas segundo a equação 1.48:³

$$\psi = e^{\hat{T}} \Phi_0 \quad (1.48)$$

Na equação 1.48, ψ é a função de onda exata não relativística, Φ_0 correspondem à determinantes de Slater HF e o operador $e^{\hat{T}}$ é definido pela expansão da série de Taylor:³

$$e^{\hat{T}} \equiv 1 + \frac{\hat{T}^1}{1!} + \frac{\hat{T}^2}{2!} + \frac{\hat{T}^3}{3!} + \dots = \sum_{K=0}^{\infty} \frac{\hat{T}^K}{K!} \quad (1.49)$$

o termo $\hat{T}$ é conhecido como operador de *cluster* e gera todos os i determinantes de Slater dos estados excitados, definido por:³

$$\hat{T} \equiv \hat{T}_1 + \hat{T}_2 + \dots + \hat{T}_n \quad (1.50)$$

$$\hat{T}_1 \Phi_0 = \sum_i^{occ} \sum_a^{virt} t_i^a \Phi_i^a \hat{T}_2 \Phi_0 = \sum_{i < j}^{occ} \sum_{a < b}^{virt} t_{ij}^{ab} \Phi_{ij}^{ab} \dots \quad (1.51)$$

onde n é o número de elétron da molécula e t é o coeficiente da expansão chamado de amplitude.^{3, 41}

O objetivo do operador $e^{\hat{T}}$ é expressar ψ como uma combinação linear de determinantes de Slater do estado fundamental e todas as excitações eletrônicas, como mostrado na equação a seguir.^{3, 41}

$$\begin{aligned} e^{\hat{T}} &= 1 + \hat{T} + \frac{1}{2}\hat{T}^2 + \frac{1}{6}\hat{T}^3 + \frac{1}{24}\hat{T}^4 + \dots = \sum_{K=0}^{\infty} \frac{\hat{T}^K}{K!} \\ &= 1 + \hat{T}_1 + (\hat{T}_2 + \frac{1}{2}\hat{T}_1^2) + (\hat{T}_3 + \hat{T}_1\hat{T}_2 + \frac{1}{6}\hat{T}_1^3) + (\hat{T}_4 + \hat{T}_3\hat{T}_1 + \frac{1}{2}\hat{T}_2^2 + \frac{1}{2}\hat{T}_1^2\hat{T}_2 + \frac{1}{24}\hat{T}_1^4) + \dots \end{aligned} \quad (1.52)$$

Os termos entre parenteses da equação 1.52 dizem respeito, respectivamente, às excitações duplas, triplas, quadruplas e assim sucessivamente. É interessante observar que ao considerar as excitações duplas o termo correspondente à excitação simples se faz presente, nas excitações triplas os termos de excitações simples e duplas também aparecem e esse padrão se repete para todas as próximas excitações. Dessa forma, os termos extras que surgem devido a expansão da equação 1.52 e adicionais aos termos conexos são chamados de termos desconexos e estes colaboram com o melhor desempenho do método CC.⁴¹

Resolver o método CC significa aplicar a função de onda descrita pela equação 1.48 na equação de Schrödinger:^{3, 41}

$$\hat{H}e^{\hat{T}}\Phi_0 = Ee^{\hat{T}}\Phi_0 \quad (1.53)$$

ou ainda:

$$E = \langle \Phi_0 | \hat{H} e^{\hat{T}} | \Phi_0 \rangle \quad (1.54)$$

A solução desse sistema de equações não é trivial. Uma das formas de resolver essas equações é truncando a expansão 1.50 para considerar apenas as excitações simples ($\hat{T}_1$, CCS), excitações duplas ($\hat{T}_2$, CCD) ou ainda as excitações simples e duplas ($\hat{T}_1 + \hat{T}_2$, CCSD). Porém, como mencionado anteriormente, mesmo truncando os termos da expansão, termos desconexos correspondentes à outras excitações também serão avaliados.

Apesar de cálculos CCSD apresentarem uma acurácia excelente e alto custo computacional, por muitas vezes o termo de excitação tripla também é almejado, para tanto existem dois meios de descrevê-los, o primeiro é considerando esse termo explicitamente da forma $\hat{T}_1 + \hat{T}_2 + \hat{T}_3$ (CCSDT), no entanto, comumente essas excitações são estimadas por métodos perturbativos e são representadas como CCSD(T).^{3, 41}

O método CC só é considerado completo quando se utiliza a equação 1.50 aplicada à 1.49 usando um conjunto completo de funções 1.48, neste caso, o método CC completo seria variacional e consistente com o tamanho, assim como o CI completo. Todavia, esse procedimento é computacionalmente inviável, portanto, um conjunto finito de funções é utilizado e a expansão de operadores 1.50 é truncada, dessa forma o método CC se torna não variacional, porém consistentes com o tamanho.^{3, 41}

Em suma, os métodos pós-HF tem como objetivo descrever a energia de correlação, E_{corr} , porém, apesar de terem alta acurácia, são métodos extremamente custosos ou até mesmo impraticáveis, dependendo no número de elétrons considerados no sistema atômico ou molecular. Podem ser variacionais e desta forma, a menor energia obtida sempre será maior que a energia real do sistema, equação 1.32, ou consistentes com o tamanho e então a energia calculada varia linearmente com o aumento do sistema, como mostra a tabela abaixo:

Tabela 1: Relação entre os métodos HF e pós-HF

Método	Escala	Consistente com o tamanho	Variacional
HF	N^4	Sim	Sim
MP2	N^5	Sim	Não
MP3	N^6	Sim	Não
CISD	N^6	Não	Sim
CCSD	N^6	Sim	Não
CCSD(T)	N^7	Sim	Não
CCSDT	N^8	Sim	Não

Fonte: H. F. III, M. Hofmann. **Computing in Science and Engineering**, v.3,p. 487-506, 2003 - Modificado

1.4.5 Teoria do Funcional da Densidade

Segundo Schrödinger, uma função de onda de um sistema químico qualquer contém todas as informações sobre suas propriedades físico-químicas como momento dipolo, polarizabilidade, distância de ligação, dentre várias outras, incluindo a simulação do espectro de infra-vermelho (IR) e ressonância magnética nuclear (RMN). Contudo, foi visto anteriormente que encontrar uma função exata para dois elétrons ou mais é impossível (devido ao termo de repulsão intereletrônica), além do aumento exponencial da complexidade da função ao aumentar o número de elétrons, uma vez que cada elétron é descrito por 4 coordenadas (3 coordenadas espaciais e 1 coordenada relacionada ao spin do elétron), a figura 7 mostra que moléculas consideradas pequenas, como o benzeno, já apresentam um alto nível de complexidade.

Figura 7: Relação entre o aumento do número de elétrons e coordenadas

Fonte: Do autor (2021)

Ademais, por mais que seja possível extrair várias informações contidas da função de onda por meio de operadores, interpretá-la é uma tarefa complicada, por não existir nenhum observável físico correspondente, apenas ao seu módulo ao quadrado equivalente à densidade eletrônica.

A forma de realizar cálculos de sistemas multieletrônicos proposto por E. Schrödinger apresentam vários percalços, como os citados anteriormente. Portanto, P. Hohenberg e W. Kohn propuseram utilizar o observável densidade eletrônica, $\rho(r)$, para substituir a função de onda, tornando a compreensão mais palatável. A teoria do funcional da densidade (*Density Functional Theory*-DFT) revolucionou a forma de calcular propriedades atômicas e moleculares reduzindo o tempo e os recursos computacionais necessários para realizar os cálculos, possibilitando o estudo de sistemas maiores, pois esse método depende apenas de 3 coordenadas espaciais. Esse método é baseado em dois postulados:

- A função de onda do estado fundamental e todas as propriedades são funcionais da densidade eletrônica;
- A energia do estado fundamental de um sistema multieletrônico sob um dado potencial externo ($V(r)$), pode ser descrita como:

$$E_v[\rho(r)] = \int V(r)\rho(r)dr + F[\rho] \quad (1.55)$$

onde F é conhecido como funcional universal de ρ , que é independente do potencial externo ($V(r)$). O método DFT apenas garante a existência dos funcionais, porém não há informações sobre a sua expressão analítica. [42](#), [43](#), [44](#), [45](#)

Tendo em vista esse novo modelo de cálculo a partir de uma densidade eletrônica, houve a necessidade de adaptar o Hamiltoniano utilizado na equação de Schrödinger para incorporar a densidade eletrônica. A energia de atração entre o núcleo e o elétron, $E_{ne}[\rho]$, e a energia de repulsão elétron-elétron, $E_{ee}[\rho]$, foram adaptadas para serem descritas como derivadas de uma densidade eletrônica da seguinte forma: [42](#), [44](#), [45](#), [41](#)

$$E[\rho] = E_T[\rho] + E_{ne}[\rho] + E_{nn}[\rho] \quad (1.56)$$

$$E_{ne}[\rho] = - \sum_a^{Nucleo} Z_a \int \frac{\rho(r)}{|r - R_a|} dr \quad (1.57)$$

e

$$E_{ee}[\rho] = \frac{1}{2} \int \int \frac{\rho(r_1)\rho(r_2)}{|r_1 - r_2|} \quad (1.58)$$

Entretanto, expressar a energia cinética, E_T , como algo que dependa da densidade eletrônica ao invés do movimento individual de cada elétrons não é trivial. Para ajudar a compreender esse fenômeno, foi empregado o conceito de gás uniforme de elétron (*uniform electron gas* - ueg), ou seja, infinitos elétrons se movendo em um volume de espaço igualmente infinito com cargas positivas uniformemente distribuída de forma que a densidade seja constantemente diferente de zero. Sendo necessário o uso de ferramentas da mecânica estatística de férmions para solucionar esse modelo. [42](#), [43](#), [44](#), [45](#)

A equação [1.56](#) mostra de forma resumida como é composta a energia total do DFT, porém, é possível reescrevê-la de uma forma mais completa:

$$E[\rho] = E_T[\rho]_{ni} + \Delta T[\rho] + E_{ne}[\rho] + E_{nn}[\rho] \Delta E_{ee} \quad (1.59)$$

onde, $E_T[\rho]_{ni}$ é a energia cinética desse modelo não-interativo do ueg, $\Delta T[\rho]$ é uma correção quando há a interação entre os elétrons e ΔE_{ee} é uma correção para todas as energias de repulsão não-clássicas.

Para calcular a equação 1.59, W. Kohn e L. J. Sham propuseram uma aproximação conhecida como LSDA (*local spin-density approximation*), na qual a energia cinética ($E_T[\rho]_{ni}$) seria calculada exatamente, a partir de um conjunto de orbitais auxiliares usados para representar a densidade eletrônica (semelhante a forma de calcular a energia cinética do método HF) e os termos de correções ($\Delta T[\rho]$ e ΔE_{ee}), estão incluídos nos termos de energia de troca e uma de correlação, respectivamente E_X e E_C . Então, a equação 1.59 pode ser reescrita como:

$$E^{KS}[\rho] = E_T^{KS} + E_{ne}[\rho] + E_{ee}[\rho] + \int [\rho] d^3\mathbf{r} + E_X + E_C \quad (1.60)$$

sendo o termo referente a energia cinética pode ser calculado como um determinante de Slater:^{41, 45}

$$E_T^{KS} = \sum_i^N \langle \phi_i | -\frac{1}{2} \nabla^2 | \phi_i \rangle \quad (1.61)$$

A energia de correlação, E_C é calculada a partir de uma aproximação utilizando o método Monte Carlo para o modelo ueg, já a energia de troca, E_X , foi determinada considerando um modelo ueg neutralizado por cargas positivas uniformemente distribuídas.

Existem vários funcionais na literatura que foram desenvolvidos para descrever, da forma mais acurada possível, a distribuição dessa densidade eletrônica ao longo da molécula e também tratar os termos de troca e correlação. Destacam-se na literatura os do tipo aproximação do gradiente generalizado (*Generalized Gradient Approximation*-GGA) e por isso serão introduzidos na próxima secção e foram selecionados para serem aplicados neste trabalho.⁴³

1.4.5.1 Aproximação do Gradiente Generalizado - GGA

Os métodos do tipo GGA visam tratar a distribuição da nuvem eletrônica de forma não uniforme, para isso os funcionais de troca correlação são modificados para incluir a densidade eletrônica e a derivada da densidade, expressa por um gradiente. Ainda pode-se mencionar os métodos híbridos que mesclam a teoria do GGA com o método HF, alcançando uma precisão ainda maior.^{41, 45, 43} Os funcionais mencionados nessa secção serão os mesmo utilizados para o desenvolvimento deste trabalho, porém, existe uma vasta coleção de outros funcionais na literatura .

O funcional BLYP é uma mistura entre dois outros funcionais B88 e o LYP (Lee, Yang e Parr-LYP), o primeiro tem o intuito de corrigir a forma que os métodos tipo LSDA

representavam a energia de troca, considerando um gás de elétron não uniforme através de um gradiente:^{45, 46}

$$\begin{aligned}\varepsilon_X^{B88} &= \varepsilon_X^{LDA} + \Delta\varepsilon_X^{B88} \\ &= -\beta\rho^{\frac{1}{3}} \frac{x^2}{1 + 6\beta x \operatorname{sen}^{-1}x}\end{aligned}\quad (1.62)$$

$$x = \frac{|\nabla\rho|}{\rho^{\frac{4}{3}}}\quad (1.63)$$

O parâmetro β é ajustado a partir de valores conhecidos de gases nobres e x é o gradiente adimensional.^{45, 47}

Já o funcional LYP inclui 4 parâmetros (a , b , c e d) ajustados através de dados do átomo de hélio atômico, porém não inclui a correlação entre *spins* paralelos quando todos estão alinhados.⁴⁵

$$\begin{aligned}\varepsilon_C^{LYP} &= -4a \frac{\rho_\alpha \rho_\beta}{\rho^2(1 + d\rho^{-\frac{1}{3}})} - ab\omega \left\{ \frac{\rho_\alpha \rho_\beta}{18} [144(2^{\frac{2}{3}})C_F(\rho_\alpha^{\frac{8}{3}} + \rho_\beta^{\frac{8}{3}}) + (47 - 7\delta|\nabla\rho|^2) \right. \\ &\quad - (45 - \delta)(|\nabla\rho_\alpha|^2 + |\nabla\rho_\beta|^2) + 2\rho^{-1}(11 - \delta)(\rho_\sigma|\nabla\rho_\sigma|^2 + \rho_\beta|\nabla\rho_\beta|^2)] \\ &\quad \left. + \frac{2}{3}\rho^2(|\nabla\rho_\sigma|^2 + |\nabla\rho_\beta|^2 - |\nabla\rho|^2) - (\rho_\alpha^2|\nabla\rho_\beta|^2 + \rho_\beta^2|\nabla\rho_\alpha|^2) \right\}\end{aligned}\quad (1.64)$$

onde

$$\begin{aligned}\omega &= \frac{e^{-c\rho^{-\frac{1}{3}}}}{\rho^{\frac{14}{3}}(1 + d\rho^{-\frac{1}{3}})} \\ \delta &= c\rho^{-\frac{1}{3}} + \frac{d\rho^{-\frac{1}{3}}}{(1 + d\rho^{-\frac{1}{3}})}\end{aligned}\quad (1.65)$$

Os próximos funcionais que serão comentados pertencem a classe dos híbridos ou também conhecidos como hyper-GGA. Esses relacionam a energia potencial entre a situação fictícia onde elétrons não interagem e assim dessa forma não tem energia de correlação ($\lambda = 0$) com o potencial real do sistema ($\lambda = 1$) e a energia de troca-correlação, E_{XC} segundo a equação:^{45, 48}

$$E_{XC} = \int_0^1 \langle \Psi_\lambda | V_{XC} | \Psi_\lambda \rangle d\lambda \quad (1.66)$$

aproximando a equação 1.66 para os dois valores final de λ :

$$E_{XC} \approx \frac{1}{2} (\langle \Psi_0 | V_{XC}(0) | \Psi_0 \rangle + \langle \Psi_1 | V_{XC}(1) | \Psi_1 \rangle) \quad (1.67)$$

O limite $\lambda = 0$ considera que os elétrons não interagem restando apenas energia de troca. Além disso, funções de ondas exatas foram utilizadas para descrever a equação 1.67, então a energia de troca obtida é a mesma daquela alcançada pelo método HF, no entanto, o segundo termo da equação é desconhecido. É possível reescrever a equação 1.67, como sendo:⁴⁵

$$E_{XC} = \frac{1}{2}[E_X^{exacto} + (E_X^{LSDA} + E_C^{LSDA})] \quad (1.68)$$

O funcional B3LYP (Becke 3 *parameter functional*-B3 + LYP) é amplamente utilizando principalmente combinado com o conjunto de base de Pople, 6-31*G, expressa e energia de troca-correlação, E_{XC} , como:^{45, 49, 50}

$$E_{XC} = (1 - a)E_X^{LSDA} + aE_X^{exact} + b\Delta E_X^{B88} + (1 - c)E_C^{LSDA} + cE_C^{LYP} \quad (1.69)$$

Os parâmetros a , b e c são determinados através de dados experimentais e dependem da forma escolhida para descrever E_X^{GGA} e E_C^{GGA} .⁴⁵

O funcional BHHLYP também faz parte do tipo híbrido e inclui parte do formalismo do funcional B88 e LYP para calcular a energia de troca-correlação segundo a equação:⁵¹

$$E_{XC} = \frac{1}{2}(E_X^{HF} + E_X^{B88} + E_C^{LYP}) \quad (1.70)$$

O funcional PBE0 é resultado do aprimoramento do funcional PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) que é um funcional do tipo GGA, como o BLYP, com a inclusão do termo de energia de troca.^{45, 52, 53}

$$E_{XC} = \frac{1}{4}E_X^{HF} + \frac{3}{4}E_X^{PBE} + E_C^{mPW91} \quad (1.71)$$

Entre os funcionais BLYP, B3LYP, PBE0, BHHLYP há um aumento na quantidade de energia de troca Hartree-Fock (E_X^{HF}) descrita em cada um dos funcionais citados, respectivamente; 0%, 20%, 25%, 50%.⁴⁸ É importante frisar que a comparação direta entre funcionais tipo "LYP" e "PBE" não está correta, pois esses consideram a descrição dos termos de correlação (E_C) de formas distintas apesar de ambos agregarem parte da energia de troca do método HF em seus funcionais.

2 OBJETIVOS

O pMCG-HF é conhecido por gerar conjuntos de base mais flexíveis e com expoentes difusos, necessitando de um número menor de funções de polarização. Entretanto, existem propriedades físico-químicas que são conhecidas por precisarem de conjuntos de base extensos e muito polarizados para obter um resultado acurado, como por exemplo a polarizabilidade.

O procedimento tradicionalmente utilizado na literatura para produzir conjuntos de base que descrevam tais propriedades consiste em adicionar mais expoentes difusos aos conjuntos já existentes, formando o conjunto de base aumentado, comumente designado como "aug". A exemplo dos conjuntos de Dunning, cc-pVXZ se tornam os aug-cc-pVXZ, ou os conjuntos de Jensen, pc-N passam a ser chamados de aug-pc-N. A proposta deste trabalho é utilizar o MCGp-HF para selecionar expoentes ainda mais difusos para formar um conjunto de base originalmente aumentado, ou seja, que não precise acrescentar expoentes extras aos já presentes no conjunto de base.

Portanto, os átomos H, B-F, Na, Al-Cl foram selecionados para fazer parte do estudo e em vez de considerá-los como espécies neutras, a proposta é retratá-los de maneira aniônica (com um elétron sobressalente) desde o início do processo de seleção das malhas para a obtenção dos expoentes que irão compor o conjunto de primitivas. Espera-se que esta nova metodologia gere um conjunto de base com expoentes ainda mais difusos, recomendado para tratar de propriedades como polarizabilidade sem perder a capacidade de prever outras propriedades como energia, predição de geometria, momento dipolo e com um baixo custo computacional.

Os conjuntos de primitivas selecionados deverão passar pelo processo de contração e polarização, para finalizar a etapa de geração dos conjuntos de base e então, serão submetidos um extenso teste molecular, no qual, foram selecionadas 49 moléculas com características distintas como neutras (polares e apolares), aniônicas (com diferentes cargas), simétricas e assimétricas, diferentes tipos de ligações (simples, duplas e triplas), e etc.

Essas moléculas serão calculadas com diferentes métodos computacionais: funcionais DFT (BLYP, B3LYP, BHHLP e PBE0), HF e MP2 com os conjuntos de base 6-311G, 6-311G+, cc-pVDZ, aug-cc-pVDZ, cc-pVTZ, aug-cc-pVTZ, pc-3, aug-pc-3, pc-4 e aug-pc-4, além do conjunto de base produzido usando a aplicação tradicional do pMCG-HF apelidado aqui de conjunto de base MCG e, é claro, o conjunto de base gerado pela nova metodologia proposta aMCG (MCG a partir de átomos aniônico).

3 METODOLOGIA

3.1 Geração dos Expoentes do Conjunto de Base

O processo de desenvolvimento de conjuntos de base pode ser resumidamente descrito pelas seguintes etapas; escolha da malha, seleção do conjuntos de primitivas, contração e polarização, apenas após a conclusão da etapa de polarização que os testes moleculares são iniciados, sendo importantíssimos para certificar o sucesso das etapas anteriores. A necessidade de respeitar essa sequência de etapas torna o processo de geração de conjuntos de base dificultoso, e devido proposta inovadora deste trabalho, o ciclo de testes teve que ser refeito diversas vezes até obter resultados com alta acurácia nas simulações moleculares realizadas.

Para determinar os expoentes do conjunto de primitivas o polinômio descrito pela equação 1.27 foi incorporado à rotina de cálculos do programa ATOM-SCF. Na figura 3.1, é apresentado um exemplo de *input* desse programa para o átomo de carbono aniônico (C^-).

Para explicitar o elétron extra do átomo para o programa foi necessário atenção ao preencher as linhas 5, 6 e as 20 linhas (11 a 30) correspondentes ao valores dos vetores de acoplamento *spin*-órbita, ilustrada pela da figura 3.1. No caso do carbono, a configuração eletrônica do átomo neutro é $1s^2, 2s^2$ e $2p^2$, ou seja, 2 tipos de orbitais com número quântico secundário diferentes, apenas os orbitais tipo *s* totalmente preenchido e 2 elétrons no orbital que não esta totalmente preenchido. No entanto, ao tratar o carbono aniônico (C^-), a configuração eletrônica passa a ser $1s^2, 2s^2$ e $2p^3$ havendo uma mudança na quantidade de elétrons no orbital que não esta totalmente preenchido.

Importante também informar ao programa como os elétrons estão organizados no orbital através dos valores tabelados pelo próprio programa dos vetores de acoplamento *spin*-órbita que dependem do termo espectroscópico de cada átomo, neste trabalho foi considerado o estado fundamental de cada átomo aniônico, como mostrado da tabela 3.1.

Para determinar a quantidade de expoentes presentes no conjunto de primitiva a energia total, correspondente à quantidade de expoentes utilizados, é comparada ao valor calculado pelo cálculo NHF obtido por T. Koga *et. al.*³⁹. Os átomos He, Be, Ne, Mg, Ar, K e Ca não foram calculados por T. Koga *et. al.* e por esse motivo, não foram incluídos neste trabalho.

Figura 8: Exemplo de *input* para o átomo de carbono do programa ATOM-SCF

```

1 Carbono      Título - Nome do Átomo
2 input para o PMCGHF  Título 2
3 6.0  Número Atômico
4 2  Quantidade de orbitais com número quântico secundário diferente
5 2,0  Quantidade de orbitais totalmente preenchidos em ordem crescente do número quântico secundário
6 0,3  Quantidade de elétrons nos orbitais que não foram preenchidos totalmente em ordem crescente de número quântico secundário
7 1,0,0,1,0,0  Diretrizes complementares para o programa como utilizar funções tipo
8 0      Gaussianas e não reotimizar os expoentes encontrados
9 10,8  Quantidade de expoentes que irão compor cada um
10 10,8  dos orbitais em ordem do número quântico secundário
11 0
12 0
13 -0.333333333
14 -0.133333333
15 0
16 0
17 0
18 0
19 0
20 0
21 0
22 0
23 0
24 0
25 0
26 0
27 0
28 0
29 0
30 0
31 3.E-05  Fatores de convergência
32 0.5
33 0 -0.36541 4  Informações sobre o Omega_min, respectivamente: número quântico secundário,
34 1 -0.4488 4  Omega_minimo e quantidade de incrementos (delta Omega)
35 0.13055 5.6601E-4 -3.02212E-4 2.15638E-5
36 0.11401 0.00196 -5.72421E-4 4.87104E-5  Incrementos (delta Omega)
37

```

Fonte: Do autor (2021)

Habitualmente, os valores iniciais das malhas são calculados a partir de um conjunto de base da literatura correspondente ao átomo estudado com o auxílio do programa ORIGIN-06. No caso deste trabalho, utilizar a metodologia tradicional poderia gerar uma malha que não descreveria o elétron extra adequadamente, por tanto, os primeiros esforços para entender como seria realizada a geração do conjunto de primitiva foi realizado apenas para os átomos de hidrogênio ao flúor, onde foram avaliados os seguintes parâmetros:

- Quantidade de 3, 4 e 5 incrementos ($\Delta\Omega$);
- Conjuntos de base da literatura utilizado para descrever os primeiros valores das malhas.

Tabela 2: Termos espectroscópicos para átomos aniônicos em seus estados fundamentais

Átomo	Termo espectroscópico
H ⁻	¹ S
Li ⁻	¹ S
B ⁻	³ P
C ⁻	⁴ S
N ⁻	³ P
O ⁻	² P
F ⁻	¹ S
Na ⁻	¹ S
Al ⁻	³ P
Si ⁻	⁴ S
P ⁻	³ P
S ⁻	² P
Cl ⁻	¹ S

Baseando nos trabalhos anteriores aplicado o MCGp-HF para os mesmo átomos na forma neutra⁸ foi constatado que a quantidade de 3 incrementos era ideal para obter conjuntos de primitivas de qualidade, porém visando alcançar uma maior flexibilização da malha, o teste com 4 e 5 incrementos também foi realizado. Entretanto, não foi possível alcançar a convergência no cálculo de determinação dos expoentes ao utilizar as malhas com 5 incrementos, portanto essa foi logo excluída do estudo.

Ao que tange à escolha do conjunto de base utilizado para obter as malhas, foram realizados testes com os conjuntos Partridge Uncontracted-3²⁹, pc-4³⁷ e os conjuntos cc-pV5Z³⁵. O Conjunto de Base Universal Iônico¹⁸ também foi testado, porém, apresentou muitos problemas de convergência e por isso não foi utilizado na análises deste trabalho.

Foi necessário decidir se o conjunto de base selecionado da literatura para compor a malha inicial seria correspondente a forma neutra, isoeletrônica ou ao próximo átomo da mesma família do átomo analisado, ou seja, no exemplo do átomo de C⁻ seria usado o conjunto de base do próprio carbono (neutro), do nitrogênio (isoeletrônico ao C⁻) ou ainda do silício (pertencente a mesma família do carbono), figura 3.1. O uso do conjunto de base do próprio átomo neutro foi logo descartado, pois a malha poderia não ser flexível o suficiente ou simplesmente não descrever o elétron extra, a exemplo do caso do Be⁻ que na forma neutra ainda não tem elétrons nos orbitais tipo *p*, sendo assim não seria possível fazer uma malha para descrever este orbital.

Quanto as opções de uso de conjuntos de base de átomos de isoeletrônicos ou átomo pertencente a mesma família, foi necessário realizar uma análise de caso-a-caso, mas de modo geral, percebeu-se que para os átomos menores B⁻ ao F⁻ foi mais simples gerar conjuntos de primitivas quando se utilizava a malha inicial de átomos pertencentes à mesma família, talvez devido à grande quantidade de expoentes necessários para compor

Figura 9: Escolhas possíveis para seleção dos conjuntos de base utilizados para descrever a malha inicial do átomo de C^-

13	14	15	16	17	18
					2 He Hélio 4,0026
5 B Boro 10,81	6 C Carbono 12,011	7 N Azoto 14,007	8 O Oxigênio 15,999	9 F Flúor 18,998	10 Ne Néon 20,180
13 Al Alumínio 26,982	14 Si Silício 28,085	15 P Fósforo 30,974	16 S Enxofre 32,06	17 Cl Cloro 35,45	18 Ar Árgon 39,948
31 Ga Gálio 69,723	32 Ge Germânio 72,630	33 As Arsênio 74,922	34 Se Selênio 78,971	35 Br Bromo 79,904	36 Kr Criptônio 83,798
49 In Índio 114,82	50 Sn Estanho 118,71	51 Sb Antimônio 121,76	52 Te Telúrio 127,60	53 I Iodo 126,90	54 Xe Xenônio 131,29

Fonte: do site "ptable.com" modificado pelo autor

esse conjunto, já para os átomos maiores Na^- ao Cl^- utilizar apenas conjuntos de bases de átomos isoeletrônicos foi suficiente, porém recomendam-se mais estudos quanto à essa questão.

Foram testados vários conjuntos de primitiva, porém apenas aqueles conjuntos cujo erro das energias estivessem na ordem de miliHartree, comparado com o valor do NHF fornecido por T. Koga *et. al.*³⁹, que foram selecionados para a etapa de contração e polarização.

3.2 Contração e Polarização

Como citado anteriormente, foi utilizado o método da contração geral¹⁰ para contrair os conjuntos de primitivas selecionados para a forma 5-Zeta, onde foram realizados diversos testes para determinar a quantidade de expoentes eliminados no processo de purificação, sendo escolhido aquele que obteve a menor perda energética possível. Essa foi

uma etapa muito desafiadora, pois por muitas vezes, ocorria uma supervalorização dos valores de energia e em alguns casos, não foi possível retirar este efeito, apenas minimizá-lo.

Nesta etapa, foi utilizando o método de contração geral e o programa CONTRACT e as energias dos conjuntos de bases contraídas foram obtidas através do programa GAUSSIAN-09⁵⁴ realizando cálculos atômicos neutros e iônicos.

Quanto a polarização, a rotina padrão adotada na metodologia original consistia em comparar os resultados obtidos pelos métodos de polarização pinçada e otimizada para definir qual traria a melhor descrição da região de valência. Entretanto, não foi possível realizar a polarização otimizada para os conjuntos de base do átomos aniônicos, pois, esses cálculos não alcançavam à convergência, talvez devido a pequenez dos expoentes gerados.

Então, foi utilizado apenas o método da polarização pinçada, onde o primeiro expoente adicionado em cada simetria assume valores entre 1 e 2 e o próximo expoente adicionado em uma mesma simetria possui aproximadamente metade do valor do anterior e assim sucessivamente para todas as simetrias.¹²

3.3 Testes Moleculares

Todos os cálculos moleculares foram realizados no cluster Euler CeMEAI do ICMC-USP, e para haver maior controle do tempo computacional, foram isolados 40 processadores em 1 nó dedicado apenas para esses cálculos. Nesse espaço dedicado, foram utilizados 8 processadores e 16GB de memória para os cálculos tipo DFT's e HF e 20 processadores e 40 GB de memória para os cálculos pós-HF, por serem cálculos mais custosos computacionalmente, e foi utilizado o programa Gaussian-09⁵⁴, como padrão desse programa, os cálculos foram realizados para moléculas à 298,150 K e a 1 atm.

Com a finalidade de testar a performance do conjunto de base aniônico feito pelo MCGp-HF, chamado ao decorrer do trabalho de aMCG-*polarização*, frente às outras bases da literatura, incluindo o conjunto de base neutro também feito pelo MCGp-HF, denominado aqui por MCG, foram selecionadas 49 moléculas entre neutras (polares e apolares) e aniônicas com diferentes cargas e as moléculas, os conjuntos de base e métodos de cálculos selecionados para este trabalho foram listados abaixo, respectivamente:

- BF_3 , BF_4^- , BH_3 , BH_4^- , CO_3^{2-} , HCO_3^- , H_2CO_3 , NO_2^- , NO_3^- , OH^- , AlF_3 , AlF_2H , AlFH_2 , AlH_3 , C_4H_6 , $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$, $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$, $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$, $\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$, C_6H_6 , $\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$, CF_4 , CH_2F_2 , CH_3F , CH_4 , CHF_3 , CO , CO_2 , F_2 , H_2 , H_3PO_4 , H_2PO_4^- , HPO_4^{2-} , PO_4^{3-} , H_2SO_4 , HSO_4^- , SO_4^{2-} , HCl , HF , LiH , NaCl , NaH , O_2 , O_3 , PH_3 , SH_2 , SO_2 , SiH_4 e SiO_2 ;
- 6-311G, 6-311G+, MCG, aMCG, cc-pvDZ, aug-cc-pVDZ, cc-pVTZ, aug-ccpVTZ, pc-3, aug-pc-3, **pc-4** e **aug-pc4**;

- B3LYP, BHHLYP, BLYP, PBE0, HF, MP2, CISD e CCSD(T).

Os conjuntos de base e métodos grifados em vermelho, apresentaram problemas de convergência ou tempo computacional muito elevado e por tanto, não puderam ser calculados para todas as moléculas selecionadas.

Essas moléculas foram montadas e visualizadas através dos programas Avogadro⁵⁵ e GaussView 6.0⁵⁶ para o sistema operacional Windows 10.

Foram propostas duas metodologias diferentes para realizar os cálculos das propriedades físico-químicas, o primeiro procedimento consistiu em calcular a otimização da geometria de cada método apenas para o conjunto de base aMCG-2d1f e essa geometria, foi copiada para os arquivos contendo com os outros conjuntos de base e então, realizado um cálculo tipo *single point* mais frequência através dos arquivos com extensão ".chk" gerada pela otimização, importante frisar que para título de comparação de tempo, os arquivos que continham o conjunto de base aMCG-2d1f também foram recalculado como um *single point* mais frequência.

O segundo teste realizado foi utilizando apenas o funcional B3LYP, uma vez que esse foi o método mais amigável para calcular as moléculas selecionadas, para otimizar as geometrias das moléculas para todos os conjuntos de base, utilizando um critério de convergência mais rigoroso, por considerar maior número de ponto na integração numérica (grid), com o auxílio da palavra chave "*integral=ultrafine*", para realizar esses testes foram utilizados 20 processadores e 40 GB de memória, devido ao maior critério de convergência e pelo uso de conjuntos de bases mais extensos como pc-4.

Foram analisadas as seguintes propriedades físico-químicas:

- Energia total;
- Momento dipolo;
- Polarizabilidade;
- Tempo Computacional.

E sempre que possível, os resultados calculados foram comparados ao experimental fornecido pelo *Computational Chemistry Comparison and Benchmark DataBase*. Para facilitar o entendimento, todos os valores de energia foram escritos em módulo.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Desenvolver conjuntos de base é uma árdua tarefa, pois a confirmação de que foram de fato escolhidas as melhores malhas, conjuntos de primitivas, contrações e polarização ocorre por meio dos testes moleculares, última etapa do trabalho. Portanto, é comum que os testes tenham que ser refeitos para que se alcance o resultado com alta acurácia.

O pMCG-HF possibilita a escolha dos expoentes mais flexíveis e difusos, e ao tratar de átomos aniônicos foi observado que essas características foram acentuadas, de forma que os conjuntos de expoentes gerados são ainda mais difusos que os presentes no conjunto MCG, isso pode ter sido a causa de alguns erros como falta de convergência, inconsistência nos resultados ou até superestimar valores, dificultando a busca por um conjunto de base preciso. Os testes mal-sucedidos, foram extremamente importantes para poder encontrar os conjuntos de base apresentados neste trabalho, portanto esses testes serão mencionados nos momentos oportunos.

Para facilitar a compreensão e as discussões, as energias serão expressas em módulo ao longo de todo o trabalho.

4.1 Geração de Expoentes

A escolha dos expoentes que compõem os conjuntos de primitiva começa com a determinação dos Ω_{min} e os incrementos $\Delta\Omega$, ou seja, encontrar uma malha que seja flexível para gerar expoentes que irão descrever os átomos e as moléculas de forma precisa. Essa investigação foi iniciada com para átomos H^- ao F^- e após testar diferentes malhas, com variadas quantidades de incrementos, observou-se que os expoentes derivados de malhas provenientes de conjuntos de base muito grandes, como por exemplo UBS, normalmente culminavam em erros de convergência ao aumentar o número de expoentes, mesmo fenômeno se repetia para malhas com 5 incrementos.

A figura 10 mostra a variação de energia à medida que os expoentes são adicionados para formar o conjunto de primitivas do ânion de carbono (C^-) com as malhas de 3 (M3I), 4 incrementos (M4I) e 5 incrementos (M5I), derivadas do conjunto de base pc-4, onde a referência para comparação foi o valor de energia obtido através da solução do NHF.³⁹

Segundo a figura 10, as três malhas tem comportamento semelhantes ao descrever as energias dos conjunto de primitivas composto por 17s11p e 18s12p expoentes, entretanto, a malha M5I falha ao descrever os próximos conjuntos, uma vez que não há convergência dos cálculos. Quanto às demais, existe uma vantagem na descrição da energia ao utilizar a malha M3I e por tanto, essa foi a quantidade de incrementos escolhida para ser aplicada nos cálculos dos outros átomos.

Figura 10: Energias para os conjuntos de primitivas gerados com as malhas de 3, 4 e 5 incrementos

Fonte: Do autor (2021)

Além de determinar a quantidade de incrementos que irão compor a malha, é importante definir qual conjunto de base da literatura que será utilizado para gerar malha inicial e para isto, foram selecionados os seguintes conjuntos de base; Partridge *Uncontracted-3*²⁹, o pc-4³⁷, os conjuntos cc-pV5Z³⁵ e Conjunto de Base Universal Iônico¹⁸.

A figura 11 apresenta uma comparação entre a geração de conjuntos de primitivas bem comportados (H^-), nos quais as energias aumentam gradativamente à medida que o número de expoentes do conjunto de primitivas é aumentado, até a convergência. Em contra ponto o caso do C^- , onde a progressão da energia dos conjuntos de primitivas derivado da malha descrita pelo conjunto de base cc-pV5Z não é bem comportada.

Figura 11: Comparação entre os valores de energia para as malhas iniciais para o átomo de H^- e C^-

Fonte: Do autor (2021)

Esse comportamento aleatório também foi observado para os conjuntos de primitivas gerados através do Conjunto de Base Universal Iônico, como mostra a figura 12, portanto,

o estudo com as malhas derivadas dos conjuntos de base cc-pV5Z e Conjunto de Base Universal Iônico foram suspensos.

Figura 12: Energia dos conjuntos de primitivas iniciais utilizando a malha do conjunto de base universal iônico para o átomo de C^-

Fonte: Do autor (2021)

Para se certificar de qual seria a melhor malha inicial (Partridge *Uncontracted-3* ou pc-4), os expoentes e os coeficientes do melhor conjunto de primitivas foram analisados, como mostra a figura 13.

Figura 13: Comparação entre os valores de expoentes e coeficientes do conjunto de primitivas do H^-

Fonte: Do autor (2021)

Entre a malha descrita pelo conjunto de base Partridge *Uncontracted-3* e pc-4, percebe-se que há uma grande diferença entre o valor do primeiro expoente, sabe-se que quanto maior o valor dos expoentes mais interna é região do átomo descrita, dessa forma, imagina-se que a malha derivada do conjunto de base Partridge *Uncontracted-3* deve

descrever melhor essa região. Entretanto, a convergência entre esses valores é observada a partir do segundo ponto da série.

Quanto aos coeficientes, a partir do sétimo expoente, os valores divergem e aqueles obtidos pela malha inicial pc-4 apresentam-se melhor balanceados, como a malha inicial Partridge *Uncontracted-3* supervalorizasse dos orbitais mais internos, além de parecer necessitar de uma quantidade maior de expoentes para descrever melhor a região mais externa.

Ao iniciar os testes de adição dos expoentes ao conjunto de primitiva, constatou-se que para ânions seria importante a implementação uma maior quantidade de expoentes para alcançar o valor do NHF e utilizar conjuntos de base do átomo equivalente isoeletrônico para construção da malha não iria proporcionar a flexibilidade requerida para encontrar os melhores expoentes para todos os átomos, sendo necessário utilizar conjuntos de base do átomo subsequente da mesma família para a criação das malhas.

Na figura 14, mostra um estudo comparativo entre as energias dos diferentes conjuntos de primitivas, utilizando uma malha feita com o conjuntos de base pc-4 de um átomo isoeletrônico (N) e o próximos átomos da mesma família (Si e Ge) do átomo de C^- .

Figura 14: Comparação entre malhas iniciais para o C^-

Fonte: Do autor (2021)

Pode-se observar uma queda brusca da energia no conjunto de primitivas 18s12p da malha pc-4 (N) em contraponto às malhas pc-4 (Si) e pc-4 (Ge) tiveram um comportamento mais estável, e as energias derivadas da malha pc-4 (Si) apresentaram melhores resultados em todos os conjuntos de primitivas da figura 14.

Nos casos dos átomos C^- , N^- , O^- e F^- houve a necessidade de utilizar a malha inicial gerada pelo conjunto de base correspondente ao próximo átomo da mesma família, essa decisão também ajudou no processo de contração e na descrição das propriedades

moleculares. Os átomos C^- , N^- e O^- foram especialmente penosos, principalmente na fase de contração, e algumas das energias dessas moléculas foram apresentadas na tabela 3.

Tabela 3: Comparação entre as energias moleculares dos átomos C, N e O.

Átomo	Malha	Expoentes	Molécula	Energia
C	pc-4 (N)	17s11p	CO	113,34741
	pc-4 (Si)	18s12p		113,35052
N	pc-4 (O)	18s12p	NO_2^-	205,12934
	pc-4 (P)	18s12p		205,23849
O	pc-4 (F)	18s12p	O_2	150,29919
	pc-4 (S)	18s12p		150,31325

Fonte: Do autor (2021)

A tabela 3 mostra como a escolha das malhas podem interferir nos valores de energia molecular e quantidade de expoentes utilizados. O caso da molécula de oxigênio, O_2 , evidencia a necessidade de se utilizar uma malha composta pelo conjunto de base do próximo átomo da mesma família, não do átomo equivalente isoeletrônico. Já no caso do átomo de C^- , são apresentados resultados com o conjunto 17s11p pois, como mostrado na figura 14, ocorreu uma grande queda na descrição da energia no conjunto de primitivas com 18s12p expoentes.

Definir a quantidade de expoentes que irão compor o conjunto de primitivas é um trabalho árduo, visto que devem ser feitos muitos testes de adição e/ou retirada de expoentes, um de cada vez, até atingir uma energia semelhantes ao NHF³⁹. Após encontrar a quantidade ideal de expoentes, a malha é otimizada para refinar a escolha dos expoentes e em alguns casos, pode haver uma melhora no valor da energia. Os melhores conjuntos de primitivas para os átomos H^- , Li^- , B^- , C^- , N^- , O^- e F^- foram listados na tabela 4.

Tabela 4: Expoentes utilizados para descrever cada átomo e suas respectivas energias (Hartree)

Átomo	Malha pc-4	Expoentes	Energia	NHF	Erro
H^-	Li	12s	0,48793	0,48793	$1,32 \cdot 10^{-6}$
Li^-	Na	18s	7,4282	7,42823	$1,83 \cdot 10^{-6}$
B^-	Al	18s12p	24,51921	24,51922	$6,36 \cdot 10^{-6}$
C^-	Si	18s12p	37,70884	37,70884	$3,24 \cdot 10^{-6}$
N^-	P	18s12p	54,32195	54,32196	$9,54 \cdot 10^{-6}$
O^-	S	18s12p	74,78974	74,78975	$9,52 \cdot 10^{-6}$
F^-	Cl	20s14p	99,45944	99,45945	$5,22 \cdot 10^{-6}$

Fonte: Do autor (2021)

Essa longa investigação foi utilizada como guia para facilitar o processo de escolher os conjuntos de primitivas dos átomos Na^- ao Cl^- , uma vez que, nessa bateria de experimentos

já se tinha conhecimento da quantidade de incrementos (3) e de qual conjunto de base (pc-4) seria usado na geração da malha inicial. Porém, para os átomos Al^- , Si^- , P^- , S^- e Cl^- não foram realizados os testes de comparação entre a obtenção da malha inicial derivada de um átomo isoeletrônico *vs.* próximo átomo da mesma família devido aos resultados já satisfatórios com a malha do átomo isoeletrônico para os átomos.

Tabela 5: Expoentes utilizados para descrever cada átomo e suas respectivas energias (Hartree)

Átomo	Malha pc-4	Expoente	Energia	NHF	Erro
Na^-	K	$23s17p$	161,85511	161,85513	$1,2 \cdot 10^{-5}$
Al^-	Si	$25s19p$	241,87824	241,87827	$2,26 \cdot 10^{-5}$
Si^-	P	$22s16p$	288,88964	288,88966	$1,99 \cdot 10^{-5}$
P^-	S	$23s17p$	340,69885	340,69887	$2,51 \cdot 10^{-5}$
S^-	Cl	$24s18p$	397,53841	397,53843	$2,02 \cdot 10^{-5}$
Cl^-	Ar	$23s17p$	459,57691	459,57693	$1,27 \cdot 10^{-5}$

Fonte: Do autor (2021)

Foi aplicada a mesma rotina utilizada para os átomos de H^- ao F^- para a determinação da quantidade de expoentes no conjunto de primitivas dos átomos Na^- ao Cl^- , entretanto, o acréscimo de expoentes precisou ser realizado com parcimônia devido à limitação do próprio programa, o qual não computava conjuntos de primitivas com 30 ou mais expoentes por número quântico secundário, por isso, não foram adicionados uma quantidade maior de expoentes.

A figura 15 resume as respectivas energias de cada um dos conjuntos de primitivas gerados e, ao comparar com o resultado NHF, observa-se que todas as energias estão comparáveis à energia do cálculo NHF. Portanto, esses conjuntos de primitivas são bons candiados para passarem pelo processo de contração e polarização.

Uma outra forma de avaliar a qualidade do conjunto de primitiva é analisando o comportamento dos seus expoentes e coeficientes. As figuras 16, 17, 18, 19 e 20 exemplificam o comportamentos dos conjuntos de primitivas selecionados, onde os expoentes foram expressos em forma de Ω , utilizando a equação 1.27 onde α são os expoentes gerados, em relação às funções pesos, $f(\alpha)$ e em todos os casos, é possível observar que as funções são bem comportadas e os coeficientes bem distribuídos.

Figura 15: Relação entre as energias dos conjuntos de primitivas e o NHF para cada átomo

Fonte: Do autor (2021)

Figura 16: Relação entre a função peso e os expoentes -Lítio

Fonte: Do autor (2021)

Figura 17: Relação entre a função peso e os expoentes - Carbono

Fonte: Do autor (2021)

Figura 18: Relação entre a função peso e os expoentes - Oxigênio

Fonte: Do autor (2021)

Figura 19: Relação entre a função peso e os expoentes - Fósforo

Fonte: Do autor (2021)

Figura 20: Relação entre a função peso e os expoentes - Cloro

Fonte: Do autor (2021)

4.2 Contração e Polarização

Como já mencionado anteriormente, o método de contração geral consiste na combinação linear de todos os expoentes dos conjuntos de primitivas,¹⁰ na qual alguns expoentes serão excluídos para evitar redundâncias por um processo de purificação de expoentes. Esse é responsável por indicar o quão compactada as funções primitivas estarão dentro do conjunto de base. Espera-se que quanto mais compactados os expoentes estiverem, maior será a perda energética, de forma que não é esperado que haja ganhos energéticos nesta etapa.

Foram realizados vários testes preliminares para determinar a forma de contração (3Z, 5Z, 6Z e 7Z) adotada neste trabalho. Para isto, é necessário comparar e analisar o desempenho de descrição de energia molecular dos conjuntos de base nas respectivas formas de contrações. Por isso, a tabela 6 a seguir, resume alguns dos resultados com os primeiros conjuntos de base contraídos e polarizados obtidos.

Tabela 6: Testes iniciais para determinar a forma da contração em Hartree

Molécula	aMCG			
	3Z	5Z	6Z	7Z
H ₂	1,17272	1,17998	1,17998	1,18048
BH ₃	26,60119	26,62370	26,62598	26,62601
CH ₄	40,51158	40,53731	40,53850	40,54026
CH ₂ F ₂	239,07737	239,10461	239,10567	239,10768
CF ₄	437,67074	437,70277	437,70152	437,70613
NO	129,92830	129,92446	129,93193	129,93995
NO ₂ ⁻	205,13888	205,12934	205,14418	205,15564
NO ₃ ⁻	280,30952	280,29332	280,31528	280,33015
O ₂	150,28870	150,29919	150,31245	150,31920
O ₃	225,45515	225,46933	225,48913	225,49934
C ₆ H ₆	232,24818	232,33060	232,33793	232,34149
C ₆ H ₅ NO ₂	436,81310	436,87355	436,89512	436,90939
CO ₂	188,60205	188,63971	188,65358	188,66085
CO	113,31483	113,34741	113,35439	113,35810
F ₂	199,59393	199,60878	199,60877	199,60975
HF	100,49025	100,49755	100,49816	100,49905

Fonte: Do autor (2021)

A tabela 6, mostra que para a maioria dos casos, há uma melhora na descrição da energia ao passar da forma de contração 3Z para a 5Z, enquanto não existem diferenças energéticas expressivas entre as formas 5Z, 6Z e 7Z. Portanto, foi preferível adotar a forma de contração 5Z como padrão neste trabalho, uma vez que esta descreve a energia satisfatoriamente (comparando aos 3Z, 6Z e 7Z) com um número menor de funções, melhorando o tempo computacional.

Importante frisar que os dados da tabela 6 são relativos aos estudos preliminares. É possível perceber algumas incongruências quanto a descrição da energia, onde o conjunto de base na forma 3Z apresenta melhor descrição da energia que o 5Z (exemplo: moléculas NO, NO₂⁻ e NO₃⁻).

Para alcançar resultados finais de contração, foram realizados vários testes para determinar a quantidade de expoentes retirados no processo de purificação. Ao longo desse processo, é possível que haja uma perda de energia a medida que os conjuntos de base se tornam mais compactados, ou seja, a medida que mais expoentes redundantes são retirados no processo de purificação. A tabela 7, mostra os melhores resultados obtidos para a contração dos átomos para a forma 5Z.

Tabela 7: Energias dos conjuntos de base pré e pós-contração

Átomo	Energia pré-contração	Energia pós-contração	Erro
H ⁻	0,48793	0,48793	1,28.10 ⁻⁸
Li ⁻	7,42823	7,42823	4,85.10 ⁻⁷
B ⁻	24,51921	24,51883	3,87.10 ⁻⁴
C ⁻	37,70884	37,70705	1,79.10 ⁻³
N ⁻	54,32195	54,35003	-2,81.10 ⁻²
O ⁻	74,78974	74,78666	3,08.10 ⁻³
F ⁻	99,45944	99,45944	9,77.10 ⁻⁷
Na ⁻	161,85511	161,85511	1,41.10 ⁻⁶
Al ⁻	241,87824	241,87705	1,19.10 ⁻³
Si ⁻	288,88964	288,88415	5,49.10 ⁻³
P ⁻	340,69885	340,69134	7,51.10 ⁻³
S ⁻	397,53841	397,53816	2,47.10 ⁻⁴
Cl ⁻	459,57691	459,57684	7,15.10 ⁻⁵

Fonte: Do autor (2021)

As figuras 21, 21 e 23 mostram as tentativas de encontrar os conjuntos de base contraídos realizadas, a partir de diferentes conjuntos de primitivas. As duas primeiras são exemplos de casos onde o processo de contração se comportou como o esperado, ou seja, a energia decresce ao passo que aumenta a quantidade de expoentes retirados. Ao analisar o comportamento da figura 21, é possível perceber que o conjunto de primitivas $18s12p$ apresenta a menor diferença entre a energia inicial e após a primeira contração, apesar de haver a maior queda energética quando um maior número de expoentes foram eliminados. No caso do C^- , figura 21, a escolha pelo conjunto de primitivas $18s12p$ foi devido seu tamanho reduzido que influencia na diminuição do tempo computacional. É importante ratificar que apesar das figuras mostrarem uma grande diferença entre as energias, essas estão na ordem de mHartree.

Figura 21: Relação entre as energias dos conjuntos de primitivas e o NHF para cada átomo

Fonte: Do autor (2021)

Figura 22: Relação entre as energias dos conjuntos de primitivas e o NHF para cada átomo

Fonte: Do autor (2021)

Como foi mostrado na tabela 7, ao contrair o conjunto de primitivas do átomo N^- houve um aumento de energia, um comportamento anômalo ao processo de contração. A figura 23 apresenta as diversas tentativas de realizar o processo de contração a partir de alguns conjuntos de primitivas diferentes e em todos os testes contraído culminaram em um aumento da energia, portanto o conjunto contraído escolhido foi o que apresentou menor erro ($18s12p$).

Figura 23: Relação entre as energias dos conjuntos de primitivas e o NHF para cada átomo

Fonte: Do autor (2021)

A próxima e última etapa para a geração de conjuntos de base é a adição de funções de polarização pelo método da polarização pinçada, no qual são escolhidos expoentes do próprio conjunto de base para compor as funções de polarização.¹² Rotineiramente, também é utilizado o método de polarização otimizada, ou seja, submeter estes expoentes escolhidos à um processo de otimização. Entretanto, esse último método apresentou problemas para alcançar a convergência dos cálculos, por isso, esse teste foi retirado do trabalho. Acredita-se que o motivo seja que a nova metodologia adotada ressaltou a característica difusa dos expoentes gerados pelo pMCG-HF, resultando em problemas numéricos.

As tabelas a seguir 9 e 8, fazem parte dos testes preliminares para determinação dos conjuntos de base e não representam os resultados finais do trabalho por apresentarem resultados de propriedades físico-químicas aquém daquelas obtidas através dos outros conjuntos de base da literatura. Acredita-se que o tamanho reduzido dos conjuntos de primitivas selecionados, menores do que os apresentados na tabela 4, tenham surtido efeito negativo na descrição das propriedades. Entretanto, esses testes foram fundamentais para entender o impacto da escolha dos expoentes de polarização utilizando o método de polarização pinçada.

A escolha dos expoentes que irão compor as funções de polarização deve ser feita com cuidado, pois esta é fundamental para a descrição da região de valência e conseqüentemente, muitas propriedades físico-químicas das moléculas como apresentado na tabela 9.

A tabela 9, mostra alguns exemplos de moléculas onde a única diferença entre os conjuntos de bases usados são os expoentes que atuam como função de polarização e, claramente é possível observar a diferença entre as energias dessas moléculas. Para a Escolha-1, o critério para a seleção dos expoentes foi primeiramente a melhora da energia atômica e logo em seguida o menor tempo computacional, que aumenta exponencialmente com o número de expoentes no conjunto de base. Já a Escolha-2, foi realizada utilizando o método da polarização pinçada, o primeiro expoente adicionado em cada simetria assume valores aproximadamente entre 1 e 2 e o próximo expoente adicionado, em uma mesma simetria¹², possui aproximadamente metade do valor do anterior como é possível observar na tabela 8.

Tabela 8: Expoentes escolhidos para testar as função de polarização

Funções polarização	H		Funções polarização	Li	
	Escolha 1	Escolha 2		Escolha 1	Escolha 2
1º p	0,06365	0,77351	1º p	0,92605	0,92605
2º p	-	0,21941	2º p	-	0,29808
1º d	-	0,77351	1º d	0,29808	0,92605
	C			N	
	Escolha 1	Escolha 2		Escolha 1	Escolha 2
1º d	0,6414	1,42125	1º d	0,72844	0,72844
2º d	-	0,52642	2º d	-	0,27574
1º f	0,23717	1,42125	1º f	0,27574	0,72844
	O			F	
	Escolha 1	Escolha 2		Escolha 1	Escolha 2
1º d	0,97098	0,95729	1º d	0,91704	1,27852
2º d	-	0,42893	2º d	-	0,57063
1º f	0,42893	0,95729	1º f	0,57063	1,27852

Fonte: Do autor (2021)

Tabela 9: Diferença energética entre diferentes tipos de polarização

Molécula	Polarização	
	Escolha-1	Escolha-2
H ₂	1,17694	1,17998
LiH	8,08168	8,08682
CH ₂ F ₂	239,09661	239,10461
NO ₂ ⁻	205,20624	205,21086
C ₅ H ₁₀ O ₂	347,10704	347,13496
CO ₃ ⁻²	263,75187	263,75975

Fonte: Do autor (2021)

Desta forma, para polarizar os conjuntos de base contraídos apresentados na tabela 7, foi utilizado o método de polarização pinçada com duas quantidades de funções diferentes, $2d1f$ (para o átomo de H⁻ e Li⁻, $2p1d$) e ainda $3d2f1g$ (para o átomo de H⁻ e Li⁻, $3p2d1f$) como serão mostrados das tabelas 10 e 11 respectivamente.

Tabela 10: Funções de polarização utilizadas e as respectivas energias

Átomo	Expoentes		Energia Polarização	Energia Contração	Erro
H^-	p	1,30685	0,48793	0,48793	$0,00.10^{-0}$
	p	0,497142			
	d	1,30685			
Li^-	p	1,531564	7,42823	7,42823	$0,00.10^{-0}$
	p	0,728765			
	d	1,531564			
B^-	d	0,935931	24,52100	24,51921	$-1,79.10^{-3}$
	d	0,375341			
	f	0,935931			
C^-	d	1,349633	37,70870	37,70870	$0,00.10^{-0}$
	d	0,609978			
	f	1,349633			
N^-	d	1,371766	54,32186	54,32145	$-4,10.10^{-4}$
	d	0,631569			
	f	1,371766			
O^-	d	1,08772	74,79021	74,78666	$-3,56.10^{-3}$
	d	0,492379			
	f	1,08772			
F^-	d	1,218802	99,45944	99,45944	$0,00.10^{-0}$
	d	0,621235			
	f	1,218802			
Na^-	d	0,935081	161,85511	161,85511	$0,00.10^{-0}$
	d	0,464935			
	f	0,935081			
Al^-	d	1,139521	241,87747	241,87705	$-4,27.10^{-4}$
	d	0,556553			
	f	1,139521			
Si^-	d	0,954061	288,88415	288,88415	$0,00.10^{-0}$
	d	0,440464			
	f	0,954061			
P^-	d	1,433099	340,69242	340,69134	$-1,08.10^{-3}$
	d	0,774593			
	f	1,433099			
S^-	d	1,597934	397,54044	397,53816	$-2,28.10^{-3}$
	d	0,849068			
	f	1,597934			
Cl^-	d	0,928986	459,57684	459,57684	$0,00.10^{-0}$
	d	0,465441			
	f	0,928986			

Tabela 11: Funções de polarização utilizadas e as respectivas energias

Átomo	Expoentes		Energia Polarização	Energia Contração	Erro
H ⁻	<i>p</i>	1,30685	0,487928	0,4879284	4,00.10 ⁻⁷
	<i>p</i>	0,497142			
	<i>p</i>	0,189859			
	<i>d</i>	1,30685			
	<i>d</i>	0,497142			
	<i>f</i>	1,30685			
Li ⁻	<i>p</i>	1,531564	7,428228	7,4282282	2,00.10 ⁻⁷
	<i>p</i>	0,728765			
	<i>p</i>	0,356458			
	<i>d</i>	1,531564			
	<i>d</i>	0,728765			
	<i>f</i>	1,531564			
B ⁻	<i>d</i>	0,935931	24,521771	24,5192065	-2,56.10 ⁻³
	<i>d</i>	0,375341			
	<i>d</i>	0,148876			
	<i>f</i>	0,935931			
	<i>f</i>	0,375341			
	<i>g</i>	0,935931			
C ⁻	<i>d</i>	1,349633	37,70705	37,7087018	1,65.10 ⁻³
	<i>d</i>	0,609978			
	<i>d</i>	0,270303			
	<i>f</i>	1,349633			
	<i>f</i>	0,609978			
	<i>g</i>	1,349633			
N ⁻	<i>d</i>	1,371766	54,325454	54,3214495	-4,00.10 ⁻³
	<i>d</i>	0,631569			
	<i>d</i>	0,289386			
	<i>f</i>	1,371766			
	<i>f</i>	0,631569			
	<i>g</i>	1,371766			

Continuação da Tabela 11

Átomo	Expoentes		Energia Polarização	Energia Contração	Erro
O ⁻	<i>d</i>	1,08772	74,790501	74,7866576	$-3,84 \cdot 10^{-3}$
	<i>d</i>	0,492379			
	<i>d</i>	0,215939			
	<i>f</i>	1,08772			
	<i>f</i>	0,492379			
	<i>g</i>	1,08772			
F ⁻	<i>d</i>	1,218802	99,459444	99,4594438	$-2,00 \cdot 10^{-7}$
	<i>d</i>	0,621235			
	<i>d</i>	0,299331			
	<i>f</i>	1,218802			
	<i>f</i>	0,621235			
	<i>g</i>	1,218802			
Na ⁻	<i>d</i>	0,935081	161,855113	161,8551126	$-4,00 \cdot 10^{-7}$
	<i>d</i>	0,464935			
	<i>d</i>	0,216127			
	<i>f</i>	0,935081			
	<i>f</i>	0,464935			
	<i>g</i>	0,935081			
Al ⁻	<i>d</i>	1,139521	241,878559	241,8770478	$-1,51 \cdot 10^{-3}$
	<i>d</i>	0,556553			
	<i>d</i>	0,261376			
	<i>f</i>	1,139521			
	<i>f</i>	0,556553			
	<i>g</i>	1,139521			
Si ⁻	<i>d</i>	0,954061	288,884155	288,8841547	$-3,00 \cdot 10^{-7}$
	<i>d</i>	0,440464			
	<i>d</i>	0,195769			
	<i>f</i>	0,954061			
	<i>f</i>	0,440464			
	<i>g</i>	0,954061			
P ⁻	<i>d</i>	1,433099	340,694098	340,6913395	$-2,76 \cdot 10^{-3}$
	<i>d</i>	0,774593			
	<i>d</i>	0,410995			
	<i>f</i>	1,433099			
	<i>f</i>	0,774593			
	<i>g</i>	1,433099			

Continuação da Tabela 11					
Átomo	Expoentes		Energia Polarização	Energia Contração	Erro
S ⁻	<i>d</i>	1,597934	397,542705	397,5381625	$-4,54 \cdot 10^{-3}$
	<i>d</i>	0,849068			
	<i>d</i>	0,427588			
	<i>f</i>	1,597934			
	<i>f</i>	0,849068			
	<i>g</i>	1,597934			
Cl ⁻	<i>d</i>	0,928986	459,576841	459,5768408	$-2,00 \cdot 10^{-7}$
	<i>d</i>	0,465441			
	<i>d</i>	0,219839			
	<i>f</i>	0,928986			
	<i>f</i>	0,465441			
	<i>g</i>	0,928986			

Fonte:Do autor (2021)

As energias apresentadas nas tabelas 10 e 11 foram obtidas através de cálculos atômicos com o método HF antes e depois da adição das funções de polarização (Energia Contração e Energia Polarização respectivamente). Essas funções são importantes principalmente para descrever da região de valência de moléculas. Assim sendo, as funções de polarização podem não exibir melhoras significativas em cálculos puramente atômico.

A adição das funções de polarização é a última etapa para a geração dos conjuntos de base e agora esses poderão ser submetidos aos testes moleculares. Entretanto, existem outros testes interessantes que podem ser realizados em ambiente atômico. Por exemplo, observar o impacto da escolha dos métodos computacionais para descrever a energia atômica e comparar com valores obtidos quando aplicado outros conjuntos de base da literatura. Esses testes foram feitos para átomos na forma aniônica, neutra e catiônica e podem ser um indicativo do comportamento dos métodos computacionais e conjuntos de base. Os dados completos poderão ser visualizados no Anexo A, a seguir, serão discutidos apenas os resultados mais relevantes.

Figura 24: Energias para o átomo de C^- com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais

Fonte: Do autor (2021)

Figura 25: Energias para o átomo de O^- com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais

Fonte: Do autor (2021)

As figuras 24 e 25, mostram o comportamento da descrição da energia ao variar os métodos computacionais tipo DFT, HF e pós-HF. Observa-se que os métodos tipo DFT supervalorizam os valores de energia em relação aos métodos pós-HF. Um possível motivo para tal desempenho é a incorporação de alguns parâmetros empíricos nos funcionais.

Além disso, percebe-se que os métodos pós-HF são mais sensíveis à variação de conjuntos de base que os funcionais DFTs. Essa diferença pode ser justificada pela distinção entre as formulações de cada métodos, onde métodos HF e pós-HF são baseados em funções de onda e o DFT baseia-se no conceito de densidade eletrônica. Já o método HF apresentou o pior desempenho entre os métodos escolhidos, porém esse é um método mais simples que não considera o termo de troca-correlação, prejudicando a descrição da energia.

Quanto aos conjuntos de base, é possível constatar que o conjunto cc-pVTZ tem a pior descrição da energia para todos os casos. É importante dizer que esses testes foram realizados para todos os átomos e obtiveram comportamento semelhante, entretanto o átomo de N^- apresentou problemas com contaminação de *spin* ao realizar cálculos pós-HF para os conjuntos de base MCG, aMCG (2d1f e 3d2f1g) e aug-pc-4.

Figura 26: Energias para o átomo de Na^- com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais

Fonte: Do autor (2021)

Figura 27: Energias para o átomo de Na^- com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais HF e pós-HF

Fonte: Do autor (2021)

A figura 26 mostra a tendência de descrição da energia ao variar os métodos computacionais para o átomo de Na^- . Novamente, observa-se que a variação dos conjuntos de base tem maior impacto ao utilizar os métodos pós-HF.

A figura 27, visa focar apenas nos resultados obtidos através dos métodos HF e pós-HF. É possível observar que para o Na^- , o conjunto de base aug-cc-pVTZ apresentou

o melhor desempenho em quase todos os métodos. Já a versão cc-pVTZ, se sobressai a partir do método MP2.

Os conjuntos de base aMCG (2d1f e 3d2f1g), pc-4 e aug-pc-4 convergem para valores semelhantes de energia nos métodos CISD e CCSD(T). O conjunto de base MCG se comportou ligeiramente aquém dos outros para todos os métodos computacionais.

Figura 28: Energias para o átomo de S^- com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais

Fonte: Do autor (2021)

Figura 29: Energias para o átomo de S^- com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais HF e pós-HF

Fonte: Do autor (2021)

Existem algumas diferenças entre o comportamento das figuras 26 e 28, principalmente analisando os resultados obtidos pelo método HF e pós-HF. Ao contrário do observado na figura 27, o gráfico da figura 29 retrata valores de energias mais organizados, ou seja, a descrição da energia melhora ao aumentar o nível de teoria de forma quase linear.

Para o átomo S^- , os conjuntos de base aug-pc-4 e pc-4 expressam os melhores resultados para a descrição da energia, seguidos pelos conjuntos de base aug-cc-pVTZ e MCG. Os resultados obtidos pelo conjunto de base aMCG-3d2g1f diverge dos encontrados pelo aMCG-2d1f, onde o primeiro apresenta um resultado semelhante aos dos outros conjuntos de base e o segundo tem o pior resultado.

A seguir será apresentado a análise para o caso dos átomos neutros, e para fins comparativos, serão selecionados os átomos selecionados a cima para serem apresentados no texto e os demais constarão no Anexo A.

Figura 30: Energias para o átomo de C com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais

Fonte: Do autor (2021)

Figura 31: Energias para o átomo de O com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais

Fonte: Do autor (2021)

Ao analisar o caso dos átomos neutros das figuras 30 e 31 e comparar com os resultados apresentados para os respectivos átomos aniônicos, figuras 24 e 25, observa-se

que para os métodos DFTs, todos os conjuntos de base tiveram desempenhos similares e o conjunto de base cc-pVTZ, que não havia apresentado um desempenho tão eficiente para os átomos na forma aniônica, neste caso, mostra-se tão eficiente quanto os outros conjuntos de base.

É interessante perceber diferenças entre os comportamentos dos funcionais ao analisar um átomo aniônico e neutro ao comparar as figuras 24 e 30, observa-se o método BLYP que no primeiro caso expressou resultados de valores energéticos entre o B3LYP e BHHLYP, nesse segundo caso, obteve ligeiramente abaixo do BHHLYP. Quanto aos métodos pós-HF, assim como na análise dos átomos aniônicos, é visto que a variação dos conjuntos de base tiveram mais impacto na variação dos valores de energia.

Figura 32: Energias para o átomo de Na com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais

Fonte: Do autor (2021)

A figura 32 mostra todos os valores de energia, tanto para os métodos DFTs quanto para os métodos HF e pós-HF e os valores de energia obtidos são extremamente semelhantes para todos os conjuntos de bases utilizados. Diferentemente do gráfico da figura 26 onde havia diferenças principalmente na descrição da energia nos métodos pós-HF.

Figura 33: Energias para o átomo de S com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais

Fonte: Do autor (2021)

Figura 34: Energias para o átomo de S com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais

Fonte: Do autor (2021)

No caso do átomo de Enxofre neutro, ao aplicar métodos pós-HF a diferença entre os conjuntos de base faz-se presente novamente como visto anteriormente nas figuras 28 e 29.

Esse teste foi repetido para aos átomos catiônicos e o comportamento das figuras apresentadas a seguir assemelham-se aos obtidos admitindo os átomos neutros.

Figura 35: Energias para o átomo de C^+ com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais

Fonte: Do autor (2021)

Figura 36: Energias para o átomo de O^+ com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais

Fonte: Do autor (2021)

Ao comparar as figuras 35 e 36 com as 30 e 31 respectivamente, observa-se a semelhança entre seus comportamentos porém, no caso do átomos catiônicos, os conjuntos de base aMCG (2d1f e 3d2f1g) apresentaram os piores desempenhos em ambos os casos.

Figura 37: Energias para o átomo de Na^+ com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais

Fonte: Do autor (2021)

Figura 38: Energias para o átomo de S^+ com diferentes conjuntos de base e métodos computacionais

Fonte: Do autor (2021)

As semelhanças entre os comportamentos das figuras 37 e 38 que apresentam os resultados de energia para os átomos Na^+ e S^+ com as figuras que representam-nos respectivamente na forma neutra, 32 e 33, são ainda mais evidentes.

4.3 Testes Moleculares

Até o momento foram relatados detalhes da geração dos conjuntos de base aMCG (2d1f e 3d2f1g) e testes atômicos realizados com átomos com diferentes cargas (aniônico, neutro e catiônico). Entretanto, esses testes não são suficientes para certificar que os conjuntos de bases gerados terão sucesso ao calcular sistemas moleculares mais complexos.

Nesta fase, serão utilizados os métodos computacionais mais difundidos na literatura, a saber; B3LYP, BHHLYP, BLYP, PBE0, HF e MP2. Infelizmente, os testes com os métodos CISD e CCSD(T) não puderam ser realizados devido ao seu alto custo computacional e problemas técnicos.

Quanto aos conjuntos de base, foram selecionados aqueles mais utilizados na literatura como 6-311G, 6-311G+, cc-pVDZ, aug-cc-pVDZ, cc-pVTZ, aug-cc-pVTZ, pc-3, aug-pc-3, além dos conjuntos gerados pelo pMCG-HF, MCG⁵⁷ e aMCG (2d1f e 3d2f1g). Já os conjuntos pc-4 e aug-pc-4, se mostraram extremamente custosos, além de terem apresentado problema de convergência, dessa forma, foram retirados dessa etapa de teste.

A seleção das 49 moléculas apresentadas visou contemplar moléculas polares e apolares e com diferentes tipos de ligações, covalentes ou iônicas, listadas a seguir; BF₃, BF₄⁻, BH₃, BH₄⁻, CO₃⁻², HCO₃⁻, H₂CO₃, NO₂⁻, NO₃⁻, OH⁻, AlF₃, AlF₂H, AlFH₂, AlH₃, C₄H₆, C₂H₄O₂, C₃H₆O₂, C₄H₈O₂, C₅H₁₀O₂, C₆H₆, C₆H₅OCH₃, CF₄, CH₂F₂, CH₃F, CH₄, CHF₃, CO, CO₂, F₂, H₂, H₃PO₄, H₂PO₄⁻, HPO₄⁻², PO₄⁻³, H₂SO₄, HSO₄⁻, SO₄⁻², HCl, HF, LiH, NaCl, NaH, O₂, O₃, PH₃, SH₂, SO₂, SiH₄ e SiO₂.

4.3.1 Geometria

Antes de calcular as propriedades físico-químicas das moléculas é necessário garantir que as geometrias foram otimizadas corretamente. Para isso serão comparados os resultados de otimização de geometria molecular usando os conjuntos de base aMCG (2d1f e 3d2f1g) com os métodos computacionais B3LYP, BHHLYP, BLYP, PBE0, HF e MP2 com os valores experimentais, quando disponíveis na literatura.

Todas as moléculas tiveram suas geometrias otimizadas, entretanto, os casos exemplificados a seguir serão aqueles cujos valores experimentais foram encontrados na literatura para comparação. A relação completa dos resultados de distância e ângulo de ligação para todas as moléculas consideradas neste trabalho constarão no Anexo B.

Espera-se os métodos computacionais apresentem desempenhos diferentes quanto a descrição de tipos de ligações/interações e ângulos de ligação⁵⁸ devido aos erros inerentes às suas formulações. Na tabela 12 a seguir serão apresentados os resultados para os cálculos de otimização de geometria obtidos pelo método DFT, com os diferentes funcionais mencionados anteriormente.

Tabela 12: Comprimento de ligação calculados pelo método DFT e experimental (Å)

Moléculas	Ligação	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	Exp
		B3LYP		BHLYP		BLYP		PBE0		
OH ⁻	O-H	0,966	0,965	0,954	0,953	0,977	0,976	0,963	0,962	0,964
AlF ₃	Al-F	1,632	1,633	1,614	1,615	1,649	1,649	1,626	1,627	1,630
BF ₃	B-F	1,314	1,314	1,300	1,300	1,327	1,327	1,309	1,309	1,307
BH ₃	B-H	1,189	1,188	1,183	1,182	1,194	1,192	1,193	1,192	1,190
C ₂ H ₄ O ₂	C=O	1,197	1,196	1,184	1,184	1,209	1,208	1,194	1,194	1,212
	C-O	1,362	1,363	1,343	1,343	1,383	1,383	1,352	1,352	1,361
	C-C	1,512	1,511	1,501	1,501	1,523	1,524	1,505	1,505	1,517
	C-H	1,092	1,091	1,084	1,084	1,098	1,097	1,093	1,092	1,100
C ₄ H ₆	C=C	1,334	1,334	1,433	1,322	1,345	1,345	1,332	1,332	1,337
	C-C	1,452	1,452	1,500	1,449	1,456	1,457	1,449	1,449	1,476
C ₆ H ₅ OCH ₃	(H5C5)C-O	1,378	1,379	1,363	1,364	1,395	1,395	1,370	1,370	1,399
	O-CH3	1,425	1,425	1,407	1,408	1,443	1,444	1,413	1,413	1,433
C ₆ H ₆	C-C	1,391	1,390	1,381	1,381	1,401	1,400	1,387	1,387	1,397
	C-H	1,082	1,081	1,074	1,074	1,089	1,088	1,083	1,083	1,084
CF ₄	C-F	1,326	1,326	1,307	1,307	1,345	1,345	1,318	1,318	1,315
CH ₂ F ₂	C-H	1,091	1,090	1,082	1,081	1,097	1,096	1,093	1,092	1,084
	C-F	1,362	1,362	1,343	1,343	1,382	1,382	1,351	1,352	1,351
CH ₃ F	C-H	1,090	1,089	1,082	1,081	1,097	1,096	1,091	1,091	1,087
	C-F	1,390	1,390	1,371	1,371	1,411	1,411	1,377	1,378	1,383
CH ₄	C-H	1,088	1,087	1,081	1,081	1,095	1,094	1,089	1,088	1,087
CHF ₃	C-H	1,090	1,089	1,080	1,080	1,096	1,095	1,092	1,092	1,098
	C-F	1,341	1,341	1,322	1,322	1,360	1,359	1,331	1,332	1,332
CO	C=O	1,125	1,125	1,113	1,112	1,137	1,137	1,124	1,123	1,128
CO ₂	C=O	1,160	1,160	1,146	1,146	1,173	1,173	1,157	1,157	1,162
F ₂	F-F	1,399	1,398	1,362	1,362	1,435	1,434	1,378	1,377	1,412
H ₂	H-H	0,744	0,743	0,738	0,737	0,748	0,746	0,746	0,745	0,741
H ₂ SO ₄	S=O	1,431	1,433	1,411	1,414	1,450	1,453	1,424	1,427	1,422
	S=O	1,414	1,417	1,395	1,398	1,433	1,436	1,408	1,411	1,422
	S-O	1,591	1,596	1,557	1,563	1,626	1,634	1,575	1,582	1,574
	O-H	0,968	0,968	0,956	0,956	0,979	0,978	0,965	0,965	0,970
HCl	H-Cl	1,284	1,284	1,273	1,273	1,295	1,294	1,281	1,281	1,275
HF	H-F	0,924	0,923	0,911	0,911	0,935	0,934	0,919	0,919	0,917
LiH	Li-H	1,584	1,588	1,574	1,583	1,594	1,593	1,589	1,596	1,595
NaCl	Na-Cl	2,375	2,373	2,362	2,361	2,391	2,388	2,367	2,366	2,361
NaH	Na-H	1,882	1,881	1,875	1,875	1,891	1,889	1,888	1,888	1,887
O ₂	O=O	1,208	1,207	1,181	1,180			1,196	1,195	1,208
O ₃	O=O	1,257	1,256	1,224	1,223	1,291	1,290	1,241	1,240	1,278
PH ₃	P-H	1,418	1,418	1,406	1,429	1,429	1,418	1,419	1,404	1,421
SH ₂	S-H	1,342	1,342	1,331	1,331	1,352	1,352	1,341	1,341	1,336
SiH ₄	Si-H	1,479	1,479	1,470	1,471	1,487	1,483	1,487	1,475	1,48
SO ₂	S=O	1,438	1,440	1,412	1,414	1,463	1,464	1,430	1,432	1,432

Fonte: Do autor (2021)

Ao observar os valores de comprimento de ligação calculados apresentadas na tabela 12, pode-se afirmar que os conjuntos de base aMCG (2d1f e 3d2f1g) descreveram de forma semelhante essa propriedade, uma vez que não existem diferenças expressivas entre os valores de comprimento de ligação calculados por um mesmo funcional. No entanto, há variação entre os valores obtidos em cada um dos métodos. Sendo essa atrelada à forma que esses funcionais foram desenvolvidos, afetando diretamente na precisão dos resultados.

A geometria das moléculas selecionadas também foram otimizadas para os métodos HF e MP2 e os resultados de comprimento de ligação podem ser observados através da tabela 13.

Tabela 13: Comprimento de ligação calculados pelo método pós-HF e experimental (Å)

Moléculas	Ligação	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	Exp
		HF		MP2		
OH ⁻	O-H	0,944	0,943	0,967	0,966	0,964
AlF ₃	Al-F	1,606	1,609	1,634	1,637	1,630
BF ₃	B-F	1,294	1,294	1,313	1,314	1,307
BH ₃	B-H	1,188	1,187	1,186	1,186	1,190
C ₂ H ₄ O ₂	C=O	1,175	1,175	1,203	1,203	1,212
	C-O	1,334	1,334	1,363	1,364	1,361
	C-C	1,508	1,508	1,503	1,504	1,517
	C-H	1,084	1,084	1,086	1,088	1,100
C ₄ H ₆	C=C	1,319	1,319	1,319	1,337	1,337
	C-C	1,464	1,464	1,464	1,451	1,476
C ₆ H ₅ OCH ₃	(H5C5)C-O	1,358	1,359			1,399
	O-CH3	1,403	1,403			1,433
C ₆ H ₆	C-C	1,382	1,382	1,389		1,397
	C-H	1,073	1,073	1,079		1,084
CF ₄	C-F	1,296	1,296	1,321	1,320	1,315
CH ₂ F ₂	C-H	1,079	1,079	1,084	1,085	1,084
	C-F	1,333	1,333	1,358	1,358	1,351
CH ₃ F	C-H	1,081	1,081	1,084	1,085	1,087
	C-F	1,361	1,361	1,386	1,387	1,383
CH ₄	C-H	1,082	1,082	1,082	1,084	1,087
CHF ₃	C-H	1,077	1,077	1,083	1,084	1,098
	C-F	1,311	1,311	1,335	1,335	1,332
CO	C=O	1,104	1,103	1,138	1,137	1,128
CO ₂	C=O	1,136	1,136	1,170	1,169	1,162
F ₂	F-F	1,330	1,330	1,405	1,401	1,412
H ₂	H-H	0,734	0,734	0,737	0,737	0,741
H ₂ SO ₄	S=O	1,398	1,400	1,4275	1,400	1,422
	S=O	1,382	1,385	1,411	1,385	1,422
	S-O	1,540	1,544	1,592	1,544	1,574
	O-H	0,946	0,946	0,961	0,946	0,97
HCl	H-Cl	1,267	1,268	1,271	1,268	1,275
HF	H-F	0,899	0,899	0,921	0,899	0,917
LiH	Li-H	1,595	1,607	1,585	1,607	1,595
NaCl	Na-Cl	2,392	2,390	2,392	2,390	2,361
NaH	Na-H	1,913	1,915	1,904	1,915	1,887
O ₂	O=O	1,158	1,157	1,257	1,157	1,208
O ₃	O=O	1,197	1,196	1,288	1,284	1,278
PH ₃	P-H	1,404	1,405	1,398	1,405	1,421
SH ₂	S-H	1,327	1,327	1,320	1,327	1,336
SiH ₄	Si-H	1,475	1,475	1,469	1,475	1,48
SO ₂	S=O	1,392	1,395	1,444	1,466	1,432

Fonte: Do autor (2021)

Como no caso anterior, os valores de comprimento de ligação exibidos na tabela

13 são semelhantes, havendo algumas variações inerentes aos métodos escolhido para o cálculo.

Visando comparar os erros entre os métodos usados, a tabela 14 mostra o erro percentual entre cada medida e o resultado experimental e o erro médio obtido foi obtido utilizando as seguintes equações 4.1 e 4.2, na qual, L_{Exp} corresponde ao comprimento de ligação experimental e $L_{Calculada}$ é o valor de comprimento de ligação calculado para as n moléculas:

$$Erro_L(n) = \frac{(L_{Exp} - L_{Calculada})100}{L_{Exp}} \quad (4.1)$$

$$Erro_{Medio} = \frac{1}{n} \sum_1^n Erro_L(n) \quad (4.2)$$

Em geral, o método que apresentou o maior erro percentuais médio foi o HF, aMCG 2d1f (1,76%) e 3d2fg (1,75%). Como já foi visto anteriormente, o método HF é um método mais rudimentar que não inclui parâmetros importantes como a energia de troca-correlação, justificando o erro apresentado.

Já o método que apresentou o menor erro percentual médio foi o DFT com o funcional B3LYP, aMCG 2d1f (0,57%) e 3d2f1g (0,56%). Segundo Vuckovic, S. e Burke, K.⁵⁸, métodos mais simples podem performar surpreendentemente melhor que métodos mais robustos, simplesmente por serem desenvolvidos com ajuda de alguns parâmetros empíricos, como já discutido anteriormente. Entretanto, o cancelamento de erro que existe ao aplicar um conjunto de base a alguns funcionais pode gerar um ajuste de dados, ao invés de mostrar o resultado real, como foi discutido por Jensen, F..⁵⁹

Os maiores erros percentuais individuais foram obtidos utilizando o método HF, destacam-se as moléculas O₃ e F₂, para a primeira 6,43% (aMCG-3d2f1g) e 6,35% (aMCG-2d1f) e a segunda 5,84% (aMCG-3d2f1g) e 5,79% (aMCG-2d1f). Em contra ponto, o método PBE0 apresentou o menor erro percentual individual observado de 0,00% para a molécula SO₂ com o conjunto de base aMCG-3d2f1g, seguido por 0,01% para a molécula LiH para o método HF e 0,02% para a molécula O₂ com o método B3LYP ambos os resultados aplicado o conjunto de base aMCG-2d1f.

Além de avaliar os comprimento de ligação, faz-se necessário observar os valores dos ângulos entre essas ligações e a relação desses valores consta nas tabelas 15 e 16 para cálculos com funcionais DFT e para métodos HF e MP2 respectivamente. Seguindo a lógica adotada para selecionar os valores de comprimento de ligação, nessas tabelas constarão somente as moléculas que tem resultados experimentais relatados na literatura. Além disso, afim de deixar a discussão mais concisa, as moléculas cujos ângulos de ligação foram de 180° ou 120° foram omitidas, e a relação completa dos resultados constarão no Anexo B.

A discussão sobre os valores de ângulos de ligação serão pautados nos erros percentuais médios mostrados na tabela 17, utilizando uma equação análoga à equação 4.1.

Como ocorreu com os valores de comprimento de ligação, o método HF apresentou o maior erro percentual médio de 1,34% (aMCG-3d2f1g) e 1,14% (aMCG-2d1f) e o menor erro médio observado foi ao utilizar o método MP2 com o conjunto de base aMCG-3d2f1g (0,76%), seguido pelo funcional B3LYP com o conjunto de base aMCG-2d1f (0,77%) e por aMCG-3d2f1g (0,78%).

Segundo Vuckovic, S. e Burke, K.⁵⁸, a quantidade de energia de troca HF incorporada pelos funcionais B3LYP e PBE0 (cerca de $\frac{1}{4}$) à suas respectivas formulações pode levar a um cancelamento de erro, favorecendo a determinação do comprimento de ligação enquanto desfavorece a descrição do ângulo de ligação. Apesar dos resultados obtidos neste trabalho corroborarem com essa constatação, percebe-se que os erros percentuais médios de ângulo de ligação foram maiores que os de comprimento de ligação para a maioria dos métodos. Desta forma, apesar de haver indícios de tal cancelamento de erro, esse pode não ser a razão principal para a diferença entre os erros percentuais médios de comprimento e ângulo de ligação mostrados neste trabalho.

Tabela 14: Erro percentual em relação aos valores experimental de comprimento de ligação

Moléculas	Ligação	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g
		B3LYP		BHHLYP		BLYP		PBE0		HF		MP2	
OH ⁻	O-H	0,22	0,11	1,09	1,18	1,37	1,24	0,12	0,21	2,07	2,15	0,35	0,19
AlF ₃	Al-F	0,13	0,17	0,99	0,91	1,15	1,17	0,24	0,17	1,45	1,31	0,25	0,45
BF ₃	B-F	0,50	0,50	0,52	0,54	1,52	1,53	0,18	0,18	1,00	0,99	0,47	0,50
BH ₃	B-H	0,11	0,19	0,60	0,70	0,35	0,19	0,22	0,18	0,21	0,24	0,30	0,32
C ₂ H ₄ O ₂	C=O	1,28	1,31	2,33	2,33	0,29	0,35	1,51	1,50	3,04	3,04	0,71	0,78
	C-O	0,10	0,12	1,32	1,33	1,62	1,64	0,63	0,63	2,18	2,16	0,15	0,20
	C-C	0,36	0,38	1,05	1,06	0,42	0,43	0,78	0,82	0,63	0,63	0,92	0,87
	C-H	0,75	0,83	1,45	1,49	0,15	0,25	0,68	0,73	1,48	1,47	1,25	1,10
C ₄ H ₆	C=C	0,23	0,25	7,18	1,11	0,63	0,59	0,40	0,40	1,38	1,34	1,38	0,03
	C-C	1,61	1,63	1,63	1,80	1,33	1,31	1,84	1,86	0,82	0,83	0,82	1,71
C ₆ H ₅ OCH ₃	(H5C5)C-O	1,50	1,46	2,57	2,54	0,29	0,29	2,07	2,08	2,90	2,89		
	O-CH3	1,33	0,58	1,81	1,76	0,70	0,73	1,40	1,38	2,12	2,09		
C ₆ H ₆	C-C	0,46	0,48	1,14	1,15	0,25	0,21	0,69	0,70	1,07	1,05	0,59	
	C-H	0,17	0,25	0,91	0,96	0,48	0,39	0,06	0,10	1,03	1,03	0,43	
CF ₄	C-F	0,85	0,84	0,58	0,59	2,31	2,27	0,24	0,24	1,48	1,47	0,44	0,35
CH ₂ F ₂	C-H	0,61	0,54	0,20	0,25	1,21	1,11	0,78	0,76	0,48	0,47	0,04	0,12
	C-F	0,82	0,83	0,58	0,57	2,29	2,29	0,03	0,05	1,35	1,33	0,52	0,51
CH ₃ F	C-H	0,29	0,18	0,47	0,52	0,88	0,78	0,40	0,34	0,60	0,59	0,27	0,18
	C-F	0,52	0,52	0,87	0,84	2,02	2,05	0,45	0,39	1,63	1,60	0,25	0,32
CH ₄	C-H	0,11	0,02	0,52	0,57	0,72	0,62	0,16	0,11	0,43	0,44	0,43	0,25
CHF ₃	C-H	0,77	0,85	1,60	1,65	0,17	0,27	0,55	0,58	1,95	1,95	1,33	1,25
	C-F	0,66	0,66	0,77	0,76	2,06	2,06	0,05	0,03	1,58	1,57	0,26	0,23
CO	C=O	0,23	0,27	1,37	1,40	0,82	0,76	0,38	0,41	2,17	2,19	0,88	0,83
CO ₂	C=O	0,17	0,19	1,39	1,39	0,98	0,94	0,43	0,44	2,27	2,26	0,65	0,60
F ₂	F-F	0,96	1,01	3,52	3,56	1,59	1,54	2,42	2,46	5,79	5,84	0,50	0,76
H ₂	H-H	0,36	0,20	0,47	0,59	0,89	0,73	0,63	0,55	0,92	0,94	0,61	0,54
H ₂ SO ₄	S=O	0,60	0,79	0,77	0,60	1,97	2,19	0,14	0,37	1,72	1,54	0,39	1,54
	S=O	0,59	0,38	1,90	1,72	0,77	0,96	0,98	0,78	2,82	2,62	0,79	2,62
	S-O	1,10	1,40	1,08	0,69	3,30	3,81	0,06	0,48	2,17	1,92	0,33	1,92
	O-H	0,24	0,26	1,44	1,47	0,93	0,82	0,52	0,53	2,49	2,51	0,90	2,51
HCl	H-Cl	0,74	0,71	0,14	0,15	1,55	1,51	0,47	0,46	0,60	0,58	0,30	0,58
HF	H-F	0,73	0,68	0,63	0,68	1,92	1,85	0,25	0,22	1,98	2,01	0,47	2,01
LiH	Li-H	0,70	0,46	1,32	0,78	0,09	0,11	0,40	0,08	0,01	0,78	0,63	0,78
NaCl	Na-Cl	0,58	0,49	0,06	0,02	1,27	1,15	0,27	0,19	1,30	1,23	1,31	1,23
NaH	Na-H	0,29	0,32	0,66	0,66	0,22	0,10	0,07	0,05	1,38	1,46	0,89	1,46
O ₂	O=O	0,02	0,12	2,21	2,30			0,98	1,08	4,16	4,25	4,08	3,65
O ₃	O=O	1,67	1,76	4,20	4,30	1,03	0,92	2,89	2,98	6,35	6,43	0,81	0,48
PH ₃	P-H	0,22	0,22	1,08	0,53	0,53	0,19	0,17	1,22	1,22	1,15	1,60	1,15
SH ₂	S-H	0,43	0,45	0,41	0,37	1,18	1,18	0,34	0,38	0,70	0,66	1,19	0,66
SiH ₄	Si-H	0,07	0,06	0,69	0,62	0,47	0,20	0,44	0,37	0,37	0,34	0,72	0,34
SO ₂	S=O	0,39	0,52	1,40	1,24	2,19	2,26	0,16	0,00	2,81	2,58	0,86	1,24
Média		0,57	0,56	1,34	1,16	1,10	1,07	0,62	0,65	1,76	1,75	0,74	0,93

Fonte: Do autor (2021)

Tabela 15: Comparação entre os ângulos de ligação calculados pelo método DFT e experimental

Moléculas	Ligação	aMCG 2d1f		aMCG 3d2f1g		aMCG 2d1f		aMCG 3d2f1g		Exp
		B3LYP		BHHLYP		BLYP		PBE0		
C ₂ H ₄ O ₂	C-C=O	125,0	125,0	124,7	124,7	125,2	125,2	124,9	124,9	126,6
	C-C-O	115,3	115,3	115,2	115,3	115,4	115,3	115,1	115,2	110,6
	O-C=O	119,8	119,7	120,1	120,0	119,5	119,4	119,9	119,9	123
C ₄ H ₆	C-C=C	124,4	124,3	109,60	124,1	124,6	124,5	124,2	124,1	122,9
C ₆ H ₅ OCH ₃	C-O-C	115,08	115,08	115,28	115,3	114,9	114,9	114,3	114,2	113,8
CF ₄	F-C-F	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
CH ₂ F ₂	H-C-H	113,5	113,5	113,0	113,0	114,0	114,1	113,1	113,1	112,8
	F-C-F	108,7	108,7	108,8	108,8	108,5	108,5	108,8	108,8	108,49
	H-C-F	108,5	108,5	108,4	108,4	108,6	108,6	108,6	108,6	108,87
CH ₃ F	H-C-H	110,2	110,2	110,0	110,1	110,4	110,4	109,9	110,0	110,2
	H-C-F	108,8	108,7	108,9	108,8	108,5	108,5	109,0	108,9	108,73
CHF ₃	F-C-F	108,5	108,5	110,5	110,5	110,4	110,4	110,4	110,4	108,8
	H-C-F	110,5	110,5	108,5	108,4	108,5	108,5	108,5	108,5	110,1
H ₂ SO ₄	H-O-S	109,8	109,4	111,3	110,6	108,7	108,1	109,7	109,0	108,5
	O-S-O	102,2	101,9	102,1	102,1	101,9	101,8	102,1	102,1	101,3
	O=S=O	123,7	123,8	123,0	123,3	124,1	124,4	123,4	123,7	123,3
O ₃	O-O=O	118,3	118,3	118,6	118,6	118,1	118,1	118,4	118,4	116,8
PH ₃	H-P-H	93,6	93,6	94,4	93,6	93,0	93,0	93,3	93,3	93,3
SH ₂	H-S-H	92,3	92,6	92,9	93,1	91,9	92,2	92,0	92,3	92,1
SiH ₄	H-Si-H	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
SO ₂	O=S=O	119,4	118,9	119,4	118,8	119,4	119,0	119,4	118,8	119,5

Fonte: Do autor (2021)

Tabela 16: Comparação entre os ângulos de ligação calculados pelo método HF e MP2 e experimental

Moléculas	Ligação	aMCG 2d1f		aMCG 3d2f1g		Exp
		HF		MP2		
C ₂ H ₄ O ₂	C-C=O	124,4	124,4	125,2	125,2	126,6
	C-C-O	115,3	115,4	115,1	115,0	110,6
	O-C=O	120,3	120,3	119,7	119,8	123
C ₄ H ₆	C-C=C	124,1	116,1	123,7	123,5	122,9
C ₆ H ₅ OCH ₃	C-O-C	116,1	116,1			113,8
CF ₄	F-C-F	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
CH ₂ F ₂	H-C-H	112,7	112,7	113,5	113,7	112,8
	F-C-F	108,9	108,9	108,7	108,7	108,49
	H-C-F	108,3	108,2	108,5	108,4	108,87
CH ₃ F	H-C-H	110,0	110,0	110,2	110,3	110,2
	H-C-F	108,9	108,9	108,8	108,7	108,73
CHF ₃	F-C-F	110,5	110,5	110,5	110,5	108,8
	H-C-F	108,5	108,5	108,5	108,4	110,1
H ₂ SO ₄	H-O-S	107,8	111,8	108,7	108,7	108,5
	O-S-O	102,4	102,3	102,5	102,5	101,3
	O=S=O	122,5	122,6	123,8	123,8	123,3
O ₃	O-O=O	119,3	119,3	116,6	116,7	116,8
PH ₃	H-P-H	95,7	95,6	93,9	93,6	93,3
SH ₂	H-S-H	94,0	94,2	91,3	92,2	92,1
SiH ₄	H-Si-H	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
SO ₂	O=S=O	119,3	118,7	119,6	119,4	119,5

Fonte: Do autor (2021)

Comparando os resultados obtidos até esse momento, o funcional B3LYP se mostrou o método mais eficiente para avaliar a geometria, pois apresentou o menor erro percentual médio tanto para comprimento quanto para ângulo de ligação, ambas as medidas abaixo de 0,80%, para as duas condições de polarização adotada neste trabalho, além do baixo custo computacional.

Por esses motivos, o funcional B3LYP foi escolhido para ser aplicado em um novo testes de otimização de geometria utilizando um maior critério de convergência (*integral=ultrafine*), com a finalidade de comparar os resultados obtidos pelos conjuntos de base propostos nesse trabalho, aMCG (2d1f e 3d2f1g), com aqueles alcançados por outros conjuntos de base (6-311G, 6-311G+, cc-pVDZ, aug-cc-pVDZ, cc-pVTZ, aug-cc-pVTZ, pc-3) e ainda o conjunto de base obtido pelo pMCG-HF a partir do átomo neutro (MCG)^{8, 57}. Os resultados obtidos serão exibidos na tabela 18 segundo as mesmas condições adotadas nas tabelas sobre geometria molecular tratadas anteriormente.

Primeiro ponto a se observar comparando as tabelas 12 e 18 é que o aumento do crivo de convergência não alterou o comprimento de ligação já calculado, indicando que essas realmente foram otimizadas com alta precisão. Para facilitar a comparação dentre os valores calculados foram utilizados os erros percentuais médios, os quais podem ser observados na tabela 19.

A tabela 19 mostra que os conjuntos de base aMCG (2d1f e 3d2f1g), MGC, cc-pVTZ, aug-cc-pVTZ e pc-3 apresentaram erros médios semelhantes, respectivamente; 0,55%, 0,56%, 0,57%, 0,56%, 0,58% e 0,57%, enquanto os conjuntos de base 6-311G e 6-311G+ obtiveram os maiores de erro médio (2,19% e 2,21%, respectivamente).

O conjunto de base de T. H. Dunning Jr. e F. Jensen são reconhecidos por apresentarem resultados acurados, apesar do custo computacional muitas vezes alto, sendo recomendados em trabalhos com geometrias ou propriedades mais desafiadoras, como distinção de estereoisômeros e cálculo de deslocamento químico⁶⁰. Ao passo que alguns conjuntos de base mais simples de J. A. Pople estão enfrentando uma reavaliação e sendo indicado para trabalhos onde há a necessidade de grande economia de tempo computacional ou atrelados à funcionais mais modernos que o B3LYP, por exemplo.^{61, 62, 59, 63}

Espera-se que conjuntos de base maiores e com funções de onda mais difusas descrevam com maior precisão a região mais distante do núcleo e por consequência, propriedades físico-químicas relacionadas com a região de valência, como comprimento de ligação. Entretanto, nota-se ao comparar as tabelas de erros percentuais 14 e 19 que geralmente, as versões dos conjuntos de base mais polarizados ou mais difusos (aMCG-3d2f1g, 6-311G+ e aug-cc-pVTZ) apresentaram erros ligeiramente maiores que os seus respectivos conjuntos de bases com menor quantidade de funções de polarização (aMCG-2d1f, 6-311G, cc-pVTZ), um comportamento não esperado.

Analisando os conjuntos de base gerados pelo pMCG-HF, aMCG-2d1f (5Z), aMCG-3d2f1g (5Z) e MCG (H-F→5Z ²⁰ e de Na-Cl→7Z ⁵⁷), verifica-se que o erro percentual médio são semelhantes, como mencionado anteriormente, com uma pequena vantagem para o conjunto de base aMCG-2d1f que apresentou um erro percentual médio ligeiramente menor que os outros.

Tabela 18: Valores de comprimento de ligação calculados com o funcional B3LYP-opt

Moléculas	Ligação	aMCG 2d1f	aMCG 3d21f	MCG	6311G	6311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc3	Exp
OH ⁻	O-H	0,966	0,965	1,002	0,987	0,966	0,993	0,970	0,971	0,966	0,964	0,964
AlF ₃	Al-F	1,632	1,633	1,688	1,696	1,634	1,674	1,658	1,645	1,643	1,633	1,630
BF ₃	B-F	1,314	1,314	1,337	1,339	1,314	1,323	1,327	1,315	1,316	1,313	1,307
BH ₃	B-H	1,189	1,188	1,189	1,189	1,187	1,204	1,200	1,188	1,188	1,187	1,190
C ₂ H ₄ O ₂	C=O	1,197	1,196	1,221	1,221	1,196	1,202	1,204	1,196	1,197	1,195	1,212
	C-O	1,362	1,363	1,393	1,394	1,363	1,365	1,368	1,363	1,364	1,362	1,361
	C-C	1,512	1,511	1,508	1,507	1,513	1,518	1,514	1,513	1,512	1,512	1,517
	C-H	1,092	1,091	1,092	1,092	1,091	1,103	1,100	1,092	1,092	1,091	1,100
C ₄ H ₆	C=C	1,334	1,334	1,341	1,342	1,334	1,343	1,344	1,334	1,334	1,334	1,337
	C-C	1,452	1,452	1,459	1,460	1,453	1,459	1,459	1,453	1,453	1,452	1,476
C ₆ H ₅ OCH ₃	(H5C5)C-O	1,38	1,379	1,409	1,410	1,379	1,381	1,384	1,379	1,379	1,378	1,399
	O-CH3	1,425	1,425	1,463	1,464	1,425	1,425	1,430	1,425	1,426	1,424	1,433
C ₆ H ₆	C-C	1,391	1,390	1,398	1,399	1,391	1,399	1,399	1,391	1,391	1,391	1,397
	C-H	1,082	1,081	1,082	1,082	1,082	1,093	1,091	1,082	1,082	1,081	1,084
CF ₄	C-F	1,326	1,326	1,371	1,373	1,326	1,329	1,334	1,326	1,327	1,325	1,315
CH ₂ F ₂	C-H	1,091	1,090	1,086	1,084	1,090	1,104	1,098	1,091	1,090	1,090	1,084
	C-F	1,362	1,362	1,412	1,419	1,362	1,362	1,372	1,360	1,363	1,362	1,351
CH ₃ F	C-H	1,090	1,089	1,088	1,087	1,090	1,104	1,098	1,090	1,090	1,089	1,087
	C-F	1,390	1,390	1,442	1,456	1,390	1,385	1,402	1,386	1,392	1,390	1,383
CH ₄	C-H	1,088	1,087	1,089	1,089	1,088	1,100	1,097	1,089	1,089	1,087	1,087
CHF ₃	C-H	1,090	1,089	1,082	1,083	1,089	1,101	1,097	1,089	1,089	1,089	1,098
	C-F	1,341	1,341	1,387	1,390	1,341	1,343	1,349	1,339	1,341	1,340	1,332
CO	C=O	1,125	1,125	1,147	1,147	1,125	1,135	1,134	1,126	1,126	1,124	1,128
CO ₂	C=O	1,160	1,160	1,185	1,184	1,159	1,167	1,167	1,160	1,161	1,159	1,162
F ₂	F-F	1,399	1,398	1,468	1,468	1,396	1,410	1,403	1,397	1,397	1,396	1,412
H ₂	H-H	0,744	0,743	0,742	0,742	0,742	0,762	0,761	0,743	0,743	0,741	0,741
H ₂ SO ₄	S=O	1,431	1,433			1,433	1,469				1,428	1,422
	S=O	1,414	1,417			1,417	1,459				1,412	1,422
	S-O	1,591	1,596			1,597	1,632				1,592	1,574
	O-H	0,968	0,968			0,967	0,976				0,966	0,97
HCl	H-Cl	1,284	1,284	1,329	1,328	1,282	1,297	1,295	1,284	1,284	1,281	1,275
HF	H-F	0,924	0,923	0,940	0,942	0,923	0,927	0,926	0,922	0,924	0,922	0,917
LiH	Li-H	1,584	1,588	1,594	1,594	1,585	1,604	1,601	1,590	1,590	1,590	1,595
NaCl	Na-Cl	2,375	2,373	2,424	2,421	2,371	2,375	2,385	2,381	2,380	2,372	2,361
NaH	Na-H	1,882	1,881	1,890	1,890	1,879	1,885	1,878	1,885	1,883		1,887
O ₂	O=O	1,208	1,207	1,258	1,258	1,204	1,210	1,208	1,206	1,205	1,203	1,208
O ₃	O=O	1,257	1,256	1,319	1,318	1,253	1,260	1,257	1,256	1,255	1,252	1,278
PH ₃	P-H	1,418	1,418	1,448	1,448	1,419	1,435	1,434	1,421	1,421	1,417	1,421
SH ₂	S-H	1,342	1,342	1,384	1,384	1,342	1,358	1,356	1,345	1,345	1,341	1,336
SiH ₄	Si-H	1,479	1,479	1,494	1,494	1,479	1,495	1,494	1,482	1,482	1,478	1,48
SO ₂	S=O	1,438	1,440	1,604	1,607	1,440	1,481	1,484	1,451	1,451	1,434	1,432

Fonte: Do autor (2021)

Tabela 19: Erro percentual em relação aos valores experimental de comprimento de ligação- B3LYP-opt

Moléculas	Ligação	aMCG 2d1f	aMCG 3d2flg	MCG	6311G	6311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc3
OH ⁻	O-H	0,22	0,11	0,16	3,96	2,43	3,05	0,59	0,76	0,16	0,02
	Al-F	0,13	0,17	0,25	3,57	4,06	2,67	1,72	0,90	0,80	0,15
	BF ₃	0,50	0,50	0,53	2,33	2,47	1,21	1,55	0,58	0,67	0,47
	BH ₃	0,11	0,19	0,23	0,08	0,08	1,21	0,82	0,16	0,16	0,25
C ₂ H ₄ O ₂	C=O	1,28	1,31	1,34	0,73	0,76	0,83	0,67	1,32	1,26	1,40
	C-O	0,10	0,12	0,11	2,35	2,42	0,26	0,51	0,14	0,20	0,06
	C-C	0,36	0,38	0,29	0,59	0,65	0,05	0,17	0,29	0,35	0,34
	C-H	0,75	0,83	0,80	0,70	0,69	0,27	0,01	0,75	0,77	0,84
C ₄ H ₆	C=C	0,23	0,25	0,21	0,30	0,40	0,44	0,53	0,23	0,20	0,25
	C-C	1,61	1,63	1,56	1,14	1,10	1,16	1,12	1,57	1,57	1,60
C ₆ H ₅ OCH ₃	(H5C5)C-O	1,50	1,46	1,43	0,74	0,81	1,29	1,08	1,44	1,40	1,49
	O-CH ₃	0,54	0,58	0,54	2,07	2,15	0,57	0,20	0,56	0,49	0,60
C ₆ H ₆	C-C	0,46	0,48	0,42	0,09	0,14	0,14	0,17	0,45	0,43	0,47
	C-H	0,17	0,25	0,22	0,18	0,16	0,84	0,65	0,18	0,19	0,25
CF ₄	C-F	0,85	0,84	0,84	4,27	4,37	1,09	1,43	0,82	0,89	0,79
CH ₂ F ₂	C-H	0,61	0,54	0,55	0,14	0,02	1,83	1,30	0,61	0,54	0,53
	C-F	0,82	0,83	0,81	4,53	5,06	0,80	1,55	0,68	0,89	0,78
CH ₃ F	C-H	0,29	0,18	0,25	0,10	0,01	1,52	1,00	0,31	0,23	0,21
	C-F	0,52	0,52	0,50	4,26	5,26	0,12	1,34	0,22	0,63	0,49
CH ₄	C-H	0,11	0,02	0,06	0,14	0,22	1,22	0,93	0,14	0,14	0,02
CHF ₃	C-H	0,77	0,85	0,84	1,43	1,39	0,31	0,13	0,79	0,83	0,85
	C-F	0,66	0,66	0,65	4,15	4,38	0,80	1,27	0,56	0,67	0,61
CO	C=O	0,23	0,27	0,30	1,71	1,68	0,58	0,54	0,16	0,20	0,39
CO ₂	C=O	0,17	0,19	0,22	1,99	1,93	0,46	0,46	0,14	0,13	0,28
F ₂	F-F	0,96	1,01	1,12	3,98	3,98	0,18	0,65	1,04	1,08	1,16
H ₂	1 H	0,36	0,20	0,15	0,12	0,12	2,78	2,65	0,26	0,24	
	S=O	0,60	0,79	0,80			3,30				0,41
	S=O	0,59	0,38	0,39			2,63				0,74
	S-O	1,10	1,40	1,49			3,69				1,12
H ₂ SO ₄	O-H	0,24	0,26	0,28			0,65				0,38
	H-Cl	0,74	0,71	0,54	4,24	4,19	1,69	1,57	0,67	0,68	0,44
	H-F	0,73	0,68	0,63	2,45	2,76	1,08	0,95	0,58	0,77	0,55
	Li-H	0,70	0,46	0,65	0,06	0,06	0,54	0,40	0,30	0,31	0,34
NaCl	Na-Cl	0,58	0,49	0,42	2,65	2,52	0,60	1,02	0,83	0,82	0,47
NaH	Na-H	0,29	0,32	0,42	0,17	0,17	0,08	0,49	0,12	0,21	
O ₂	O=O	0,02	0,12	0,31	4,16	4,12	0,16	0,02	0,15	0,24	0,41
O ₃	O=O	1,67	1,76	1,92	3,19	3,12	1,42	1,67	1,69	1,79	2,01
PH ₃	P-H	0,22	0,22	0,18	1,89	1,89	1,01	0,92	0,01	0,01	0,27
SH ₂	S-H	0,43	0,45	0,47	3,56	3,57	1,62	1,53	0,64	0,64	0,38
SiH ₄	Si-H	0,07	0,06	0,05	0,91	0,91	1,00	0,91	0,11	0,11	0,11
SO ₂	S=O	0,39	0,52	0,57	12,00	12,24	3,41	3,65	1,29	1,35	0,16
Média		0,55	0,56	0,57	2,19	2,22	1,18	0,98	0,58	0,60	0,57

Fonte: Do autor (2021)

Os valores de ângulos de ligação calculados e os erros percentuais obtidos utilizando o funcional B3LYP com os conjuntos de base da literatura também foram comparados e os resultados foram exibidos na tabela 20 e 21 respectivamente.

Repetindo os resultados obtidos no primeiro estudo comparando as metodologias (funcionais da densidade, HF e MP2) o erro percentual médio dos valores de ângulo de ligação aumentou para todos os conjuntos de base comparado ao erro dos valores de comprimento de ligação. Os conjuntos de base aMCG-2d1f, MCG e aMCG-3d2f1g apresentaram os menores erros, respectivamente 0,79%, 0,79% e 0,80%, seguidos pelo conjunto de base pc-3 com um erro médio de 0,79%. Assim como os resultados já observado anteriormente na análise de comprimento de ligação, os conjuntos de base 6-311G+ e 6-311G apresentaram o maior erros percentual médio, seguido pelos erros apresentados pelos conjuntos aug-cc-pVDZ e cc-pVDZ.

Novamente, os erros percentuais médios para ângulo de ligação foram geralmente maiores que os de comprimento de ligação, porém com menor discrepância entre os valores obtidos para cada conjuntos de base.

Os conjuntos de base aMCG (2d1f e 3d2f1g) gerados neste trabalho apresentaram desempenho satisfatório frente aos outros conjuntos da literatura, incluindo o conjunto de base MCG, obtendo inclusive o menor erro percentual médio para ambas as propriedades discutidas nessa fase.

Tabela 20: Valores de ângulo de ligações comparado com valores experimental- B3LYP-opt

Moléculas	Ligação	aMCG 2d1f	aMCG 3d2flg	MCG	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc3	Exp
C ₂ H ₄ O ₂	C-C=O	125,0	125,0	124,9	125,4	125,3	124,9	124,9	124,9	125,0	124,9	126,6
	C-C-O	115,3	115,3	115,3	115,5	115,9	115,3	115,3	115,2	115,3	115,3	110,6
	O-C=O	119,8	119,7	119,8	119,1	118,8	119,8	119,8	119,9	119,7	119,8	123
C ₄ H ₆	C-C=C	124,4	124,3	124,3	124,5	124,5	124,3	124,2	124,3	124,3	124,3	122,9
C ₆ H ₅ OCH ₃	C-O-C	115,08	115,05	114,9	115,9	116,1	114,40	114,5	114,8	114,8	115,0	113,8
	F-C-F	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
CH ₂ F ₂	H-C-H	113,5	113,5	113,4	114,9	115,7	112,6	114,2	113,2	113,7	113,4	112,8
	F-C-F	108,7	108,7	108,7	108,3	108,2	108,8	108,6	108,7	108,7	108,7	108,49
	H-C-F	108,5	108,5	108,5	108,5	108,1	108,8	108,3	108,6	108,4	108,5	108,87
CH ₃ F	H-C-H	110,2	110,2	110,1	110,6	111,3	109,4	110,5	109,9	110,2	110,2	110,2
	H-C-F	108,8	108,7	108,8	108,3	107,5	109,6	108,4	109,1	108,7	108,8	108,73
CHF ₃	F-C-F	108,5	108,5	108,5	108,2	108,2	108,5	108,4	108,5	108,4	108,5	108,8
	H-C-F	110,5	110,5	110,4	110,7	110,7	110,4	110,5	110,4	110,5	110,5	110,1
H ₂ SO ₄	H-O-S	109,8	109,4	109,2			106,2					108,5
	O-S-O	102,2	101,9	102,0			96,0					101,3
	O=S=O	123,7	123,8	123,9			122,7					123,3
O ₃	O-O=O	118,3	118,3	118,4	118,1	118,3	118,0	118,1	118,2	118,3	118,3	116,8
PH ₃	H-P-H	93,6	93,6	93,5	94,3	94,3	93,1	93,3	93,4	93,5	93,5	93,3
SH ₂	H-S-H	92,3	92,6	92,6	94,0	93,9	92,3	92,5	92,6	92,6	92,5	92,1
SiH ₄	H-Si-H	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
SO ₂	O=S=O	119,4	118,9	118,8	114,1	113,4	117,7	117,5	118,3	118,3	119,2	119,5

Fonte: Do autor (2021)

Figura 39: Comparação entre os erros percentuais médios de comprimento e ângulo de ligação

Fonte: Do autor (2021)

Tabela 21: Erro percentual em relação aos valores experimental de ângulo entre as ligações - B3LYP-opt

Moléculas	Ligação	aMCG 2d1f	aMCG 3d2flg	MCG	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc3
C ₂ H ₄ O ₂	C-C=O	1,30	1,30	1,31	0,96	1,03	1,35	1,35	1,33	1,29	1,33
	C-C-O	4,22	4,26	4,22	4,41	4,77	4,22	4,22	4,15	4,27	4,26
	O-C=O	2,60	2,66	2,61	3,14	3,39	2,56	2,56	2,52	2,67	2,63
C ₄ H ₆	C-C=C	1,22	1,18	1,17	1,32	1,31	1,11	1,08	1,17	1,16	1,15
C ₆ H ₅ OCH ₃	C-O-C	1,13	1,10	1,01	1,88	1,99	0,53	0,62	0,89	0,90	1,07
CF ₄	F-C-F	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
CH ₂ F ₂	H-C-H	0,61	0,64	0,56	1,83	2,58	0,21	1,25	0,37	0,76	0,57
	F-C-F	0,18	0,18	0,19	0,14	0,26	0,33	0,06	0,21	0,16	0,19
	H-C-F	0,31	0,37	0,31	0,35	0,72	0,04	0,56	0,21	0,40	0,35
CH ₃ F	H-C-H	0,03	0,01	0,05	0,36	1,04	0,74	0,28	0,30	0,04	0,02
	H-C-F	0,04	0,00	0,05	0,38	1,10	0,76	0,29	0,32	0,04	0,02
CHF ₃	F-C-F	0,30	0,32	0,30	0,53	0,57	0,30	0,39	0,27	0,33	0,31
	H-C-F	0,32	0,34	0,31	0,54	0,58	0,32	0,41	0,29	0,35	0,33
H ₂ SO ₄	H-O-S	1,18	0,79	0,63			2,08				
	O-S-O	0,86	0,63	0,68			5,27				
	O=S=O	0,30	0,44	0,47			0,52				
O ₃	O-O=O	1,29	1,25	1,33	1,10	1,32	1,02	1,09	1,17	1,29	1,28
PH ₃	H-P-H	0,29	0,29	0,24	1,06	1,06	0,25	0,01	0,07	0,18	0,23
SH ₂	H-S-H	0,21	0,49	0,50	2,06	1,95	0,19	0,39	0,49	0,53	0,47
SiH ₄	H-Si-H	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03
SO ₂	O=S=O	0,09	0,49	0,61	4,55	5,07	1,53	1,65	1,02	1,02	0,27
Média		0,79	0,80	0,79	1,37	1,60	1,11	0,90	0,82	0,86	0,81

Fonte: Do autor (2021)

Foram comparadas as geometrias obtidas pela aplicação dos conjuntos de base, tanto os tradicionais da literatura tanto os feitos pelo pMCG-HF (para átomos neutros, MCG, ou para átomos aniônicos, aMCG), porém as comparações e discussões sobre os tempos computacionais serão realizadas em uma seção dedicada ao assunto.

Sabendo que os conjuntos de base aMCG (2d1f e 3d2f1g) descrevem satisfatoriamente as geometrias das moléculas propostas, deu-se início ao terceiro e maior teste realizado deste trabalho, a predição de propriedades físico-químicas das moléculas calculadas considerando não somente a energia molecular como outras propriedades, como já listadas anteriormente.

Percebendo que o conjunto de base aMCG-2d1f é competente para determinar as geometrias e considerando que realizar a otimização de geometria para todos os conjuntos de base seria um trabalho com alto custo computacional, optou-se por realizar cálculos tipo *single point* da seguinte forma; a geometria foi otimizada apenas com o conjunto de base aMCG-2d1f para cada método computacional selecionado e essa geometria foi aplicada aos outros conjuntos de base. Dessa forma, todas as propriedades físico-química calculadas consideraram a mesma geometria.

Como funcional B3LYP apresentou uma boa predição da geometria, decidiu-se utilizá-lo em cálculos de otimização de geometria para todos os conjuntos de base. Por isso, quando for abordado valores referentes ao cálculo *single point*, será utilizado o sigla "sp"(B3LYP-sp) e quando os valores forem referentes ao cálculo de otimização de geometria para todos os conjuntos de base, então será usado a sigla "opt"(B3LYP-opt).

4.3.2 Energia

A primeira propriedade físico-química analisada é a energia total das moléculas calculadas e como já discutido anteriormente, essa energia considera a energia cinética, potencial e a repulsão entre os elétrons, como mostrado na equação 1.36. Como não há um paralelo experimental para essa propriedade, a comparação será realizada entre os valores de energias obtidos pelos conjuntos de base. Infelizmente, alguns cálculos apresentaram problemas de convergência, ora na fase de otimização da geometria, ora na fase de cálculos tipo *single point* ou foram extremamente custosos computacionalmente, principalmente para os métodos pós-HF (MP2) com conjuntos de base como pc-4 e aug-pc-4, tornando-os impraticáveis.

A tabela 22 apresenta os resultados para a energia (em Hartree) para o funcional B3LYP-sp, onde foi possível calcular as energias moleculares para todos os conjuntos de bases testados, com uma única exceção, o conjunto de base aug-pc-3, que apresentou alguns problemas para a conclusão dos cálculos (convergência ou quantidade de memória insuficiente) para calcular as moléculas $C_4H_8O_2$, $C_6H_5OCH_3$, C_6H_6 e PO_4^{-3} , de fato, esse é um conjunto de base extenso e é esperado alguns percalços ao utilizá-los em cálculos moleculares.

Para ajudar a analisar os dados da tabela 22, as diferenças entre a energia calculada por cada um dos outros conjuntos de base e a obtida pelo conjunto de aMCG-2d1f ($\Delta E = E_{aMCG-2d1f} - E_{outros}$) foram organizados na figura 40, onde os nomes das moléculas foram trocados por números de 1 a 49 que seguem a mesma sequência das moléculas da tabela 22. Se o $\Delta E < 0$, o conjunto de base usado no cálculo *single point* obteve resultado melhor que o do conjunto de base aMCG-2d1f e caso $\Delta E > 0$, então o conjunto de base aMCG-2d1f que obteve a melhor energia.

No geral, os valores de ΔE não foram exorbitantes e como o esperado conjuntos de base menores como 6-311G, 6-311G+ e cc-pVDZ obtiveram as maiores diferenças. Já o conjunto de base aMCG-3d2f1g alcançou resultados semelhantes em energia ao aMCG-2d1f, uma vez que o valor de ΔE manteve-se constante e aproximadamente próximo a zero para todas as moléculas.

Interessante observar que o conjunto MCG e aug-pc-3 performaram de forma semelhante e ligeiramente melhor para a maioria das moléculas, especialmente melhores para as moléculas 31, 32, 33, 37, 38 e 49 respectivamente as moléculas $H_2PO_4^-$, H_2SO_4 , H_3PO_4 , HPO_4^{-2} , HSO_4^- e SO_4^- .

O conjunto de base MCG⁸ está contraído na forma 5Z para os átomos H, B, C, N, O e F e para 7Z os átomos Na, Al, Si, P, S e Cl, a maior quantidade de funções não contraídas não explica completamente a melhora de desempenho desse conjunto, uma vez que de modo geral e independentemente da contração adotada, as energias obtidas pelo

conjunto de base MCG foram melhores que aMCG-2d1f. Esse resultado pode ser devido ou diferença entre a geração dos conjuntos de base em si, no caso, partir do átomo neutros *vs* aniônico, ou ao fato de terem sido realizados cálculos tipo *single point*.

Para sanar essa dúvida, as diferenças de energia obtidos pelos cálculos tipo *single point*, figura 40, e a otimização de geometria para cada conjunto de base, figura 41, foram comparadas e nota-se que o comportamento de ambas as figuras são semelhantes, portanto a diferença entre as energias aMCG e MCG está atrelada à metodologia de geração do conjunto de base em si.

O resultados de energias para o funcional BLYP são apresentados na tabela 24 e neste caso, apesar de insistentemente aplicar diversas geometrias iniciais como ponto de partida para realizar o processo de otimização, não houve convergência para os cálculos das moléculas CO_3^{-2} , HPO_4^{-2} , O_2 e PO_4^{-3} utilizando o conjunto de base aMCG-2d1f. Portanto, não foi possível obter o resultado de energias e outras propriedades físico-químicas para essas moléculas com outros conjuntos de base. Os cálculos usando os conjuntos de base pc-3 e aug-pc-3 apresentaram problemas para calcular a molécula $\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$, já as $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$ e $\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$ só apresentaram problemas de convergência quando calculadas com o conjunto aug-pc-3.

A diferença entre as energias calculadas com o conjunto de base aMCG-2d1f e os outro conjuntos de base, $\Delta E = E_{aMCG-2d1f} - E_{outros}$, foram realizadas e o resultado está expresso na figura 42. O comportamento do conjunto de base mais polarizado, aMCG-3d2f1g, novamente se mostra-se semelhante ao aMCG-2d1f, uma vez que o ΔE é aproximadamente zero para a maioria do casos calculados, destacam-se as molécula H_2CO_3 (30) e H_3PO_4 (32). A primeira apresentou a maior diferença dentre os valores de energia e a segunda o menor valor calculado. Novamente, o conjunto de base MCG apresentou resultados semelhantes ao conjunto de base pc-3 e aug-pc-3.

Os resultados de energia correspondentes ao funcional BHHLYP encontram-se na tabela 25, e assim como o funcional B3LYP, foi possível realizar todos os cálculos de otimização de geometria para as moléculas com o conjunto de base aMCG-2d1f. Entretanto, como já ocorrido com os outros funcionais, o cálculo das moléculas $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$, $\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$, $\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$ e C_6H_6 não alcançaram a convergência ao utilizar o conjunto de base aug-pc-3. Além disso, o conjunto de base MCG apresentou o mesmo problema para a molécula AlF_2H .

Tabela 22: Resultados de energia em Hartree para o funcional B3LYP-sp

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2flg	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3	aug pc-3
BF ₄ ⁻	424,7572	424,7565	424,7569	424,5934	424,6184	424,5315	424,5899	424,7054	424,7205	424,7635	424,7635
BH ₄ ⁻	27,2814	27,2805	27,2812	27,2631	27,2661	27,2520	27,2655	27,2767	27,2789	27,2822	27,2822
CO ₃ ⁻²	263,8011	263,7822	263,7842	263,6173	263,6903	263,6013	263,7278	263,7402	263,7918	263,8134	263,8287
HCO ₃ ⁻	264,5926	264,5553	264,5580	264,4288	264,4552	264,4486	264,5073	264,5560	264,5734	264,5985	264,5988
NO ₂ ⁻	205,2536	205,2385	205,2400	205,1186	205,1542	205,1323	205,1963	205,2171	205,2421	205,2594	205,2615
NO ₃ ⁻	280,5027	280,4787	280,4812	280,3291	280,3589	280,3574	280,4180	280,4626	280,4818	280,5085	280,5088
OH ⁻	75,8317	75,8314	75,8327	75,7464	75,8087	75,7209	75,8169	75,7904	75,8363	75,8409	75,8444
AlF ₂ H	443,0091	442,9926	443,0016	442,8877	442,8999	442,8700	442,9038	442,9723	442,9792	443,0135	443,0136
AlF ₃	542,3834	542,3652	542,3757	542,2132	542,2324	542,1856	542,2353	542,3321	542,3420	542,3897	542,3898
AlFH ₂	343,6261	343,6118	343,6188	343,5511	343,5573	343,5449	343,5628	343,6037	343,6074	343,6286	343,6286
AlH ₃	244,2411	244,2295	244,2341	244,2116	244,2119	244,2174	244,2193	244,2330	244,2336	244,2418	244,2418
BF ₃	324,7305	324,7293	324,7296	324,5847	324,5934	324,5693	324,5956	324,6964	324,7011	324,7351	324,7351
BH ₃	26,6268	26,6257	26,6263	26,6125	26,6126	26,6092	26,6121	26,6242	26,6244	26,6273	26,6274
C ₂ H ₄ O ₂	229,1955	229,1613	229,1644	229,0596	229,0678	229,0905	229,1160	229,1726	229,1777	229,2000	229,2000
C ₃ H ₆ O ₂	268,5272	268,4870	268,4908	268,3733	268,3809	268,4067	268,4339	268,5015	268,5064	268,5324	268,5325
C ₄ H ₆	156,0686	156,0452	156,0475	155,9956	155,9978	156,0002	156,0116	156,0559	156,0575	156,0720	156,0720
C ₄ H ₈ O ₂	307,8581	307,8120	307,8165	307,6854	307,6932	307,7212	307,7508	307,8293	307,8344	307,8641	
C ₅ H ₁₀ O ₂	347,1891	347,1372	347,1423	346,9976	347,0056	347,0356	347,0681	347,1572	347,1625	347,1960	
C ₆ H ₅ OCH ₃	346,9233	346,8716	346,8765	346,7564	346,7617	346,7850	346,8066	346,8944	346,8985	346,9303	
C ₆ H ₆	232,3516	232,3167	232,3201	232,2478	232,2503	232,2621	232,2739	232,3334	232,3356	232,3566	
CF ₄	437,7079	437,6986	437,7010	437,4984	437,5083	437,5062	437,5441	437,6616	437,6693	437,7136	437,7136
CH ₂ F ₂	239,1090	239,1016	239,1032	239,0001	239,0097	238,9892	239,0187	239,0818	239,0884	239,1125	239,1125
CH ₃ F	139,8162	139,8096	139,8108	139,7521	139,7596	139,7414	139,7612	139,7998	139,8044	139,8185	139,8186
CH ₄	40,5418	40,5358	40,5364	40,5206	40,5210	40,5160	40,5204	40,5382	40,5384	40,5427	40,5427
CHF ₃	338,4109	338,4026	338,4046	338,2535	338,2630	338,2493	338,2841	338,3739	338,3814	338,4155	338,4155
CO	113,3676	113,3505	113,3517	113,2958	113,2991	113,3212	113,3301	113,3573	113,3588	113,3699	113,3699
CO ₂	188,6788	188,6501	188,6520	188,5549	188,5603	188,5982	188,6140	188,6606	188,6634	188,6819	188,6819
F ₂	199,6091	199,6083	199,6086	199,5465	199,5554	199,5133	199,5354	199,5864	199,5914	199,6115	199,6117
H ₂	1,1806	1,1803	1,1805	1,1766	1,1766	1,1734	1,1738	1,1800	1,1800	1,1807	1,1807
H ₂ CO ₃	265,1431	265,1039	265,1069	264,9745	264,9842	265,0229	265,0538	265,1158	265,1219	265,1480	265,1480
H ₂ PO ₄ ⁻	643,8514	643,7877	643,8012	643,5033	643,5033	643,5996	643,6779	643,7904	643,8097	643,8664	643,8667
H ₂ SO ₄	700,4681	700,4047	700,4219	699,9688	699,9688	700,2196	700,2703	700,4076	700,4155	700,4854	700,4856
H ₃ PO ₄	644,3696	644,3049	644,3186	644,0024	644,0024	644,1349	644,1915	644,3166	644,3265	644,3839	644,3842

Continuação da tabela														
HCl	460,8518	460,8471	460,8479	460,8104	460,8104	460,8104	460,8104	460,8221	460,8276	460,8430	460,8443	460,8525	460,8525	460,8525
HF	100,4990	100,4981	100,4989	100,4601	100,4601	100,4601	100,4601	100,4355	100,4608	100,4836	100,4901	100,5007	100,5008	100,5008
HPO ₄ ⁻²	643,1075	643,0525	643,0651	642,7869	642,7869	642,7869	642,7869	642,8144	642,9414	643,0282	643,0713	643,1257	643,1277	643,1277
HSO ₄ ⁻	699,9614	699,8996	699,9163	699,4672	699,4672	699,4672	699,4672	699,6944	699,7667	699,8940	699,9103	699,9794	699,9796	699,9796
LiH	8,0843	8,0831	8,0872	8,0854	8,0854	8,0854	8,0855	8,0835	8,0842	8,0871	8,0876	8,0886	8,0887	8,0887
NaCl	622,6287	622,6257	622,6276	622,5940	622,5940	622,5940	622,5949	622,5935	622,5997	622,6175	622,6191	622,6325	622,6328	622,6328
NaH	162,8747	162,8761	162,8763	162,8592	162,8592	162,8592	162,8594	162,8629	162,8639	162,8710	162,8714	162,8780	162,8780	162,8780
O ₂	150,3356	150,3132	150,3142	150,2559	150,2559	150,2559	150,2625	150,2715	150,2882	150,3192	150,3234	150,3377	150,3379	150,3379
O ₃	225,5236	225,4904	225,4919	225,3942	225,3942	225,3942	225,4045	225,4259	225,4530	225,4991	225,5055	225,5271	225,5274	225,5274
PH ₃	343,1887	343,1736	343,1763	343,1336	343,1336	343,1336	343,1340	343,1597	343,1626	343,1800	343,1805	343,1902	343,1903	343,1903
PO ₄ ⁻³	642,1598	642,1482	642,1622	641,7941	641,7941	641,7941	641,8843	641,7946	642,0170	642,0450	642,1442	642,1872	642,1872	642,1872
SH ₂	399,4400	399,4335	399,4360	399,3853	399,3853	399,3853	399,3859	399,4095	399,4149	399,4310	399,4323	399,4414	399,4415	399,4415
SiH ₄	291,9266	291,9237	291,9246	291,8799	291,8799	291,8799	291,8801	291,8977	291,8993	291,9183	291,9187	291,9290	291,9290	291,9290
SiO ₂	440,0612	440,0330	440,0383	439,8958	439,8958	439,8958	439,9045	439,9454	439,9689	440,0339	440,0385	440,0671	440,0672	440,0672
SO ₂	548,7410	548,7022	548,7158	548,4572	548,4572	548,4572	548,4658	548,5990	548,6274	548,7045	548,7099	548,7504	548,7509	548,7509
SO ₄ ⁻²	699,2309	699,1763	699,1924	698,7532	698,7532	698,7532	698,7896	698,9247	699,0458	699,1478	699,1865	699,2529	699,2545	699,2545

Fonte: Do autor (2021)

Tabela 23: Resultados de energia em Hartree para o funcional B3LYP-opt

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3
BF ₄ ⁻	424,7572	424,7546	424,7569	424,5949	424,6208	424,5316	424,5903	424,7055	424,7205	424,7635
BH ₄ ⁻	27,2814	27,2797	27,2812	27,2630	27,2661	27,2523	27,2656	27,2767	27,2789	27,2822
CO ₃ ⁻²	263,8019	263,7821	263,7842	263,6240	263,6968	263,6032	263,7294	263,7411	263,7928	263,8142
HCO ₃ ⁻	264,5926	264,5553	264,5580	264,4317	264,4584	264,4489	264,5075	264,5560	264,5734	264,5985
NO ₂ ⁻	205,2536	205,2385	205,2400	205,1242	205,1586	205,1327	205,1964	205,2171	205,2421	205,2594
NO ₃ ⁻	280,5027	280,4787	280,4812	280,3347	280,3647	280,3574	280,4180	280,4626	280,4818	280,5085
OH ⁻	75,8317	75,8314	75,8327	75,7473	75,8091	75,7214	75,8169	75,7904	75,8363	75,8409
AlF ₂ H	443,0091	442,9991	443,0016	442,8914	442,9048	442,8717	442,9045	442,9725	442,9793	443,0135
AlF ₃	542,3834	542,3731	542,3757	542,2184	542,2390	542,1885	542,2363	542,3323	542,3422	542,3897
AlFH ₂	343,6261	343,6169	343,6188	343,5532	343,5601	343,5457	343,5632	343,6037	343,6075	343,6286
AlH ₃	244,2411	244,2328	244,2341	244,2117	244,2120	244,2174	244,2193	244,2330	244,2336	244,2418
BF ₃	324,7305	324,7281	324,7296	324,5862	324,5952	324,5695	324,5961	324,6964	324,7011	324,7351
BH ₃	26,6268	26,6251	26,6263	26,6125	26,6126	26,6096	26,6122	26,6242	26,6244	26,6274
C ₂ H ₄ O ₂	229,1955	229,1613	229,1644	229,0616	229,0700	229,0909	229,1162	229,1726	229,1777	229,2000
C ₃ H ₆ O ₂	268,5272	268,4870	268,4908	268,3754	268,3832	268,4073	268,4342	268,5015	268,5064	268,5325
C ₄ H ₆	156,0686	156,0452	156,0475	155,9958	155,9980	156,0009	156,0121	156,0559	156,0575	156,0720
C ₄ H ₈ O ₂	307,8581	307,8120	307,8165	307,6876	307,6955	307,7219	307,7513	307,8293	307,8344	307,8642
C ₅ H ₁₀ O ₂	347,1891	347,1372	347,1423	346,9998	347,0079	347,0365	347,0686	347,1572	347,1625	347,1960
C ₆ H ₅ OCH ₃	346,9233	346,8716	346,8765	346,7582	346,7636	346,7860	346,8074	346,8944	346,8986	346,9303
C ₆ H ₆	232,3516	232,3167	232,3201	232,2481	232,2506	232,2629	232,2746	232,3334	232,3356	232,3566
CF ₄	437,7079	437,6986	437,7010	437,5059	437,5162	437,5063	437,5443	437,6616	437,6693	437,7136
CH ₂ F ₂	239,1090	239,1016	239,1032	239,0036	239,0140	238,9895	239,0189	239,0818	239,0884	239,1125
CH ₃ F	139,8162	139,8096	139,8108	139,7536	139,7618	139,7418	139,7614	139,7998	139,8044	139,8185
CH ₄	40,5418	40,5358	40,5364	40,5206	40,5210	40,5163	40,5206	40,5382	40,5384	40,5427
CHF ₃	338,4110	338,4026	338,4046	338,2588	338,2690	338,2494	338,2844	338,3739	338,3814	338,4155
CO	113,3676	113,3505	113,3517	113,2908	113,3000	113,3214	113,3303	113,3573	113,3588	113,3699
CO ₂	188,6788	188,6501	188,6520	188,5572	188,5625	188,5985	188,6142	188,6606	188,6634	188,6819
F ₂	199,6091	199,6083	199,6086	199,5497	199,5586	199,5133	199,5354	199,5864	199,5914	199,6115
H ₂	1,1806	1,1803	1,1805	1,1766	1,1766	1,1736	1,1740	1,1800	1,1800	1,1807
H ₂ CO ₃	265,1431	265,1039	265,1069	264,9775	264,9875	265,0232	265,0540	265,1158	265,1219	265,1480
H ₂ PO ₄ ⁻	643,8514	643,7978	643,8012	643,5088	643,5360	643,6043	643,6826	643,7907	643,8100	643,8664
H ₂ SO ₄	700,4681	700,4047	700,4219			700,2270				700,4854
H ₃ PO ₄	644,3856	644,3143	644,3186	644,0344	644,0507	644,1576	644,2121	644,3332	644,3425	644,3998

Continuação da tabela										
HCl	460,8518	460,8471	460,8480	460,8109	460,8114	460,8222	460,8277	460,8430	460,8443	460,8525
HF	100,4990	100,4981	100,4989	100,4480	100,4605	100,4356	100,4608	100,4836	100,4901	100,5007
HPO ₄ ⁻²	643,1081	643,0628		642,7748	642,8237	642,8222	642,9485	643,0299	643,0725	643,1262
HSO ₄ ⁻	699,9615	699,8996	699,9163	699,5509	699,5752	699,7017	699,7750	699,8947	699,9111	699,9794
LiH	8,0843	8,0831	8,0872	8,0854	8,0855	8,0835	8,0842	8,0871	8,0876	8,0886
NaCl	622,6287	622,6257	622,6276	622,5943	622,5951	622,5935	622,5997	622,6175	622,6191	622,6324
NaH	162,8747	162,8761	162,8763	162,8592	162,8594	162,8629	162,8639	162,8710	162,8714	162,8780
O ₂	150,3356	150,3132	150,3142	150,2591	150,2656	150,2715	150,2882	150,3192	150,3234	150,3378
O ₃	225,5236	225,4904	225,4919	225,4014	225,4114	225,4259	225,4530	225,4991	225,5055	225,5271
PH ₃	343,1887	343,1755	343,1763	343,1347	343,1351	343,1601	343,1629	343,1800	343,1806	343,1902
PO ₄ ⁻³	642,1598	642,1569	642,1639	641,8197	641,9182	641,7992	642,0225	642,0453	642,1446	642,1872
SH ₂	399,4400	399,4335	399,4360	399,3870	399,3875	399,4098	399,4151	399,4310	399,4323	399,4414
SiH ₄	291,9266	291,9207	291,9246	291,8801	291,8803	291,8979	291,8995	291,9183	291,9187	291,9290
SiO ₂	440,0614	440,0274	440,0383	439,9026	439,9124	439,9463	439,9700	440,0339	440,0385	440,0674
SO ₂	548,7411	548,7022	548,7159	548,5028	548,5124	548,6034	548,6324	548,7049	548,7104	548,7505
SO ₄ ⁻²	699,2309	699,1763	699,1924	698,8321	698,8788	698,9314	699,0542	699,1483	699,1873	699,2529

Fonte: Do autor (2021)

Figura 40: Diferença entre as medidas de energia moleculares calculadas com o funcional B3LYP-sp

Fonte: Do autor (2021)

Figura 41: Diferença entre as medidas de energia moleculares calculadas com o funcional B3LYP-opt

Fonte: Do autor (2021)

Tabela 24: Resultados de energia em Hartree para o funcional BLYP

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3	aug pc-3
BF_4^-	424,7150	424,7113	424,7128	424,5509	424,5823	424,4747	424,5437	424,6576	424,5437	424,7223	424,7224
BH_4^-	27,2396	27,2382	27,2393	27,2208	27,2248	27,20477	27,2223	27,2340	27,2223	27,2407	27,2408
CO_3^{2-}											
HCO_3^-	264,5608	264,5198	264,5225	264,4029	264,4346	264,4047	264,4726	264,5197	264,4726	264,5678	264,5683
NO_2^-	205,2463	205,2310	205,2326	205,1156	205,1573	205,1144	205,1879	205,2049	205,1879	205,2531	205,2562
NO_3^-	280,4923	280,4672	280,4697	280,3273	280,3630	280,3351	280,40528	280,4468	280,405275	280,4992	280,4997
OH^-	75,8202	75,8224	75,8239	75,72882	75,7998	75,6981	75,8067	75,7737	75,8067	75,8316	75,8371
AlF_2H	442,9787	442,9586	442,9677	442,8597	442,8741	442,8338	442,8682	442,9389	442,8682	442,9838	442,9839
AlF_3	542,3534	542,3311	542,3417	542,1862	542,2087	542,1491	542,1992	542,2987	542,1992	542,3606	542,3607
AlFH_2	343,5947	343,5774	343,5844	343,5219	343,5291	343,5087	343,5273	343,5697	343,5273	343,5978	343,5978
AlH_3	244,2084	244,1943	244,1989	244,1805	244,1808	244,1811	244,1836	244,1983	244,1836	244,2095	244,2096
BF_3	324,7001	324,6957	324,6975	324,5594	324,5701	324,5324	324,5625	324,6632	324,5625	324,7051	324,7051
BH_3	26,5943	26,5925	26,5935	26,5806	26,58069	26,5740	26,5781	26,5914	26,5781	26,5950	26,5950
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	229,1390	229,1006	229,1039	229,0105	229,0201	229,0261	229,0557	229,1136	229,0557	229,1441	229,1441
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	268,4439	268,3986	268,4028	268,2985	268,3075	268,3139	268,3458	268,4155	268,3458	268,4499	268,4500
C_4H_6	155,9859	155,9586	155,9612	155,9163	155,9189	155,9109	155,9250	155,9716	155,9250	155,9898	155,9899
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	307,7482	307,6961	307,7010	307,5850	307,5942	307,6000	307,6353	307,7162	307,6353	307,7552	
$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$	347,0527	346,9937	346,9993	346,8716	346,8809	346,8861	346,9250	347,0171	346,9249	347,0606	
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$	346,7832	346,7236	346,7291	346,6245	346,6305	346,6337	346,6597	346,7509	346,6597		
C_6H_6	232,2422	232,2014	232,2054	232,1429	232,1458	232,1447	232,1594	232,2215	232,1594	232,2480	232,2481
CF_4	437,6764	437,6642	437,6668	437,4786	437,4910	437,4643	437,5088	437,6261	437,5088	437,6827	437,6828
CH_2F_2	239,0763	239,0670	239,0687	238,9712	238,9835	238,9484	238,9831	239,0463	238,9831	239,0802	239,0803
CH_3F	139,7814	139,7734	139,7747	139,7189	139,7283	139,7004	139,7242	139,7633	139,7242	139,7842	139,7842
CH_4	40,5047	40,4977	40,4984	40,4846	40,4850	40,4751	40,48167	40,5008	40,4817	40,5058	40,5058
CHF_3	338,3794	338,3687	338,3708	338,2291	338,2415	338,2082	338,2492	338,3389	338,2492	338,3845	338,3845
CO	113,3551	113,3361	113,3373	113,2883	113,2923	113,3055	113,3163	113,3437	113,3163	113,3578	113,3578
CO_2	188,6650	188,6333	188,6352	188,5509	188,5572	188,5799	188,5980	188,6451	188,5980	188,6684	188,6685
F_2	199,6115	199,6099	199,6102	199,5505	199,5619	199,5095	199,5361	199,5865	199,5361	199,6143	199,6144
H_2	1,1702	1,1698	1,1701	1,1666	1,1666	1,1619	1,1627	1,1696	1,1627	1,1703	1,1703
H_2CO_3	265,1052	265,1039	265,0648	264,9427	264,9544	264,9760	265,0118	265,0749	265,0118	265,1108	265,1108
H_2PO_4^-	643,7967	643,7267	643,7406	643,4457	643,4738	643,5342	643,6224	643,7295	643,6224	643,8129	643,8133
H_2SO_4	700,4236	700,3530	700,3706	699,9521	699,9689	700,1724	700,2282	700,3595	700,2282	700,4412	700,4414
H_3PO_4	644,3261	644,2395	644,2685	643,9680	643,9849	644,0864	644,1465	644,2687	644,1465	644,3411	644,3412

Continuação da tabela													
HCl	460,8311	460,8247	460,8256	460,7901	460,7905	460,7973	460,8042	460,8202	460,8042	460,8322	460,8322	460,8322	460,8322
HF	100,4889	100,4878	100,4887	100,4360	100,4513	100,4194	100,4495	100,4715	100,4495	100,4911	100,4911	100,4912	100,4912
HPO ₄ ⁻²													
HSO ₄ ⁻	699,9193	699,8508	699,8679	699,4653	699,4892	699,6452	699,7273	699,8465	699,7273	699,9381	699,9381	699,9384	699,9384
LiH	8,0685	8,0674	8,0712	8,0694	8,0694	8,0672	8,0679	8,0710	8,0679	8,0731	8,0731	8,0731	8,0731
NaCl	622,6009	622,5955	622,5975	622,5649	622,5656	622,5590	622,5659	622,5851	622,5659	622,6058	622,6058	622,6061	622,6061
NaH	162,8602	162,8606	162,8608	162,8436	162,8438	162,8449	162,8460	162,8538	162,8460	162,8640	162,8640		
O ₂													
O ₃	225,5401	225,5038	225,5052	225,4229	225,4347	225,4382	225,4676	225,5133	225,4676	225,5438	225,5438	225,5442	225,5442
PH ₃	343,1564	343,1402	343,1426	343,1052	343,1054	343,1237	343,1274	343,1457	343,1274	343,1582	343,1582	343,1582	343,1582
PO ₄ ⁻³													
SH ₂	399,4141	399,4061	399,4084	399,3623	399,3627	399,3798	399,3864	399,4031	399,3864	399,4158	399,4158	399,4159	399,4159
SiH ₄	291,8856	291,8780	291,8818	291,8428	291,843	291,8531	291,8557	291,8756	291,8557	291,8884	291,8884	291,8884	291,8884
SiO ₂	440,0494	440,0122	440,0221	439,8981	439,9080	439,9313	439,9558	440,0194	439,9558	440,0560	440,0560	440,0561	440,0561
SO ₂	548,7298	548,6875	548,7004	548,4731	548,4827	548,5870	548,6178	548,6907	548,6178	548,7393	548,7393	548,7398	548,7398
SO ₄ ⁻²	699,1898	699,1312	699,1474	698,7443	698,7882	698,8692	699,0090	699,0985	699,0090	699,2144	699,2144	699,2172	699,2172

Fonte: Do autor (2021)

Figura 42: Diferença entre as medidas de Energia moleculares calculadas com o funcional BLYP

Fonte: Do autor (2021)

A figura 43 mostra a diferença entre os valores calculados de energia com o conjunto de base aMCG-2d1f e os outros conjuntos (ΔE). O uso do funcional BHHLYP gerou as menores diferenças entre os valores de energia, de forma que os resultados obtidos com os conjuntos de base com o MCG e pc-3 se equipararam aos aMCG (2d1f e 3d2f1g) para a maioria das moléculas. Apenas os conjuntos de base 6-311G e 6-311G+ que apresentaram as maiores valores de ΔE .

A combinação do conjunto de base aMCG-2d1f e o funcional PBE0 também culminou na otimização de todas as geometria, porém houveram problemas com a etapa do cálculo *single point* para os conjuntos de base pc-3 ($C_6H_5OCH_3$) e aug-pc-3 ($C_4H_8O_2$, $C_5H_{10}O_2$ e $C_6H_5OCH_3$) cujo critério de convergência não foi alcançado. Quanto a diferença entre os valores de energia expressos na figura 44, observa-se que novamente o conjunto de base MCG tem comportamento semelhante ao aMCG (2d1f e 3d2f1fg).

Tabela 25: Resultados de energia em Hartree para o funcional BHHLYP

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3	aug pc-3
BF ₄ ⁻	424,5977	424,5991	424,6001	424,4310	424,4310	424,3850	424,4340	424,5510	424,5629	424,6028	424,6029
BH ₄ ⁻	27,24386	27,2434	27,2440	27,2249	27,2250	27,2197	27,2295	27,2401	27,2416	27,2444	27,24445
CO ₃ ⁻²	263,6544	263,6301	263,6317	263,4712	263,4712	263,4753	263,5822	263,6011	263,6431	263,6636	263,6658
HCO ₃ ⁻	264,4337	264,4012	264,4038	264,2593	264,2593	264,3000	264,3512	264,4007	264,4154	264,4383	264,4385
NO ₂ ⁻	205,1303	205,1160	205,1176	204,9880	204,9880	205,0191	205,0742	205,0982	205,1188	205,1350	205,1364
NO ₃ ⁻	280,3403	280,3182	280,3206	280,1532	280,1532	280,2060	280,2578	280,3051	280,3205	280,3451	280,3453
OH ⁻	75,7813	75,7793	75,7805	75,7022	75,7022	75,6829	75,7656	75,7452	75,7835	75,7884	75,7904
AlF ₂ H		442,9025	442,9113	442,7895	442,7895	442,7808	442,8105	442,8808	442,8872	442,9170	442,9171
AlF ₃	542,2573	542,2446	542,25463	542,0831	542,0831	542,0652	542,116438	542,2094	542,2189	542,2614	542,2616
AlFH ₂	343,5637	343,552917	343,559831	343,4853	343,4853	343,4871	343,504757	343,5438	343,5472	343,5645	343,5645
AlH ₃	244,2112	244,202064	244,206743	244,1786	244,1786	244,1909	244,192344	244,2051	244,2055	244,2103	244,2104
BF ₃	324,611	324,61105	324,612417	324,4568	324,4568	324,4543	324,477858	324,5793	324,5833	324,615	324,6151
BH ₃	26,6032	26,602574	26,603027	26,5872	26,5872	26,58799	26,589818	26,60089	26,60104	26,60357	26,60358
C ₂ H ₄ O ₂	229,0347	229,034659	229,037542	228,9162	228,9162	228,9661	228,987968	229,0431	229,0475	229,0676	229,0677
C ₃ H ₆ O ₂	268,3344	268,334422	268,337857	268,2007	268,2007	268,2568	268,279821	268,3452	268,3495	268,3728	268,3729
C ₄ H ₆	156,9902	156,990189	156,992759	156,9191	156,9191	156,94	156,956333	156,996	156,9998	157,0125	157,0126
C ₄ H ₈ O ₂	307,6332	307,633236	307,637211	307,4836	307,4836	307,5456	307,570506	307,6461	307,6505	307,6771	
C ₅ H ₁₀ O ₂	346,9322	346,932211	346,93673	346,7665	346,7665	346,8344	346,861463	346,9471	346,9517	346,9815	
C ₆ H ₅ OCH ₃	346,6635	346,6635	346,6677	346,5243	346,5243	346,5780	346,595735	346,6803	346,6838	346,7116	
C ₆ H ₆	232,1695	232,1695	232,1725	232,0847	232,0847	232,1158	232,1250	232,1818	232,1837	232,2018	
CF ₄	437,5420	437,5366	437,5388	437,3162	437,3162	437,3487	437,3815	437,4994	437,5059	437,5470	437,5471
CH ₂ F ₂	239,0062	239,0011	239,0025	238,8907	238,8907	238,8934	238,9182	238,9813	238,9867	239,0090	239,0090
CH ₃ F	139,7462	139,7413	139,7424	139,6786	139,6786	139,6769	139,6933	139,7314	139,7352	139,7481	139,7481
CH ₄	40,5050	40,5002	40,5006	40,4815	40,4815	40,4824	40,485284	40,5018	40,5019	40,5057	40,5057
CHF ₃	338,2761	338,2708	338,2727	338,1076	338,1076	338,1223	338,1521	338,2421	338,2483	338,2800	338,2800
CO	113,3091	113,2943	113,2955	113,2296	113,2296	113,2657	113,2730	113,2996	113,3009	113,3110	113,3110
CO ₂	188,5536	188,5536	188,5555	188,4400	188,4400	188,5022	188,5160	188,5618	188,5643	188,5812	188,5812
F ₂	199,5232	199,5232	199,5235	199,4571	199,4571	199,4321	199,4505	199,5021	199,5060	199,5249	199,5250
H ₂	1,1704	1,1704	1,1706	1,1660	1,1660	1,1642	1,164492	1,1701	1,1701	1,1708	1,1708
H ₂ CO ₃	265,0054	264,9716	264,9744	264,8235	264,8235	264,8927	264,9194	264,9807	264,9858	265,0095	265,0096
H ₂ PO ₄ ⁻	643,6364	643,6269	643,6397	643,2839	643,2839	643,4400	643,5097	643,6273	643,6433	643,6950	643,6952
H ₂ SO ₄	700,2465	700,2442	700,2605	699,7339	699,7339	700,0510	700,0983	700,2418	700,2485	700,3141	700,3143
H ₃ PO ₄	644,1765	644,1487	644,1785	643,8147	643,8147	643,9941	644,0447	644,1738	644,1816	644,2341	644,2343

Continuação da tabela											
HCl	460,8310	460,8282	460,8291	460,7876	460,7876	460,8055	460,8010	460,8245	460,8255	460,8304	460,8305
HF	100,4570	100,4566	100,4574	100,4071	100,4071	100,3996	100,4201	100,4435	100,4484	100,4584	100,4584
HPO ₄ ⁻²	642,8911	642,8812	642,8930	642,5496	642,5496	642,6582	642,7678	642,8629	642,8980	642,9475	642,9485
HSO ₄ ⁻	699,7892	699,7362	699,7520	699,2488	699,2488	699,5280	699,5920	699,7271	699,7403	699,8051	699,8054
LiH	8,0695	8,0682	8,0724	8,0707	8,0707	8,0690	8,0696	8,0725	8,0728	8,0735	8,0735
NaCl	622,5881	622,5878	622,5899	622,5552	622,5552	622,5601	622,5656	622,5817	622,5831	622,5884	622,5887
NaH	162,8417	162,8442	162,8445	162,8275	162,8275	162,8335	162,8344	162,8408	162,8412	162,8432	162,8433
O ₂	150,2528	150,2330	150,2340	150,1662	150,1662	150,1919	150,2068	150,2380	150,2414	150,2547	150,2548
O ₃	225,3803	225,3507	225,3524	225,2359	225,2359	225,2854	225,3112	225,3578	225,3635	225,3835	225,3838
PH ₃	343,1576	343,1438	343,1466	343,0964	343,0964	343,1320	343,1342	343,1508	343,1512	343,1578	343,1578
PO ₄ ⁻³	641,9778	641,9427	641,9541	641,5985	641,5985	641,6406	641,8299	641,8772	641,9573	641,9995	642,0241
SH ₂	399,4128	399,4080	399,4107	399,3538	399,3538	399,3860	399,3904	399,4059	399,4069	399,4129	399,4129
SiH ₄	291,8951	291,8908	291,8950	291,8412	291,8412	291,8694	291,8703	291,8886	291,8888	291,8960	291,8961
SiO ₂	439,9292	439,9292	439,9406	439,7741	439,7741	439,8442	439,8672	439,9340	439,9380	439,9629	439,9630
SO ₂	548,603	548,6030	548,6173	548,3193	548,3193	548,4946	548,5213	548,6032	548,6080	548,6456	548,6461
SO ₄ ⁻²	699,0571	699,0092	699,0248	698,5412	698,5412	698,7646	698,8681	698,9822	699,0131	699,0755	699,0764

Fonte: Do autor (2021)

Tabela 26: Resultados de energia em Hartree para o funcional PBE0

Molécula	MCG	aMCG 2dIf	aMCG 3d2flg	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3	aug pc-3
BF ₄ ⁻	424,2830	424,3332	424,3342	424,1711	424,1928	424,1215	424,17279	424,2830	424,2966	424,3384	424,3385
BH ₄ ⁻	27,2151	27,2190	27,2194	27,2027	27,2054	27,1971	27,2066	27,2152	27,2171	27,2200	27,2200
CO ₃ ⁻²	263,4554	263,4928	263,4947	263,3350	263,3999	263,3315	263,4439	263,4554	263,5024	263,5232	263,5339
HCO ₃ ⁻	264,2723	264,2730	264,2755	264,1414	264,1646	264,1753	264,2268	264,2723	264,2880	264,3121	264,3123
NO ₂ ⁻	204,9978	205,0181	205,0195	204,8946	204,9266	204,9204	204,9777	204,9978	205,0205	205,0373	205,0393
NO ₃ ⁻	280,1722	280,1875	280,1898	280,0310	280,0573	280,0752	280,1292	280,1722	280,1892	280,2151	280,2154
OH ⁻	75,7025	75,7403	75,7416	75,6590	75,7162	75,6393	75,7268	75,7025	75,7445	75,7490	75,7522
AlF ₂ H	442,6370	442,6584	442,6673	442,5505	442,5612	442,5399	442,57243	442,6370	442,6436	442,6751	442,6752
AlF ₃	541,9060	541,9406	541,9512	541,7848	541,8019	541,7654	541,8143	541,9060	541,9157	541,9605	541,9607
AlFH ₂	343,3594	343,3685	343,3752	343,3056	343,3110	343,3047	343,3215	343,3594	343,3630	343,3814	343,3815
AlH ₃	244,0804	244,0779	244,0818	244,0584	244,0587	244,0673	244,0686	244,0804	244,0809	244,0864	244,0864
BF ₃	324,3712	324,4036	324,4049	324,2578	324,2654	324,2506	324,2741	324,3712	324,3756	324,4086	324,4087
BH ₃	26,5659	26,5677	26,5680	26,5551	26,5552	26,5551	26,5567	26,5659	26,5660	26,5687	26,5687
C ₂ H ₄ O ₂	228,9140	228,9050	228,9078	228,7980	228,8055	228,8408	228,8629	228,9140	228,9187	228,9398	228,9398
C ₃ H ₆ O ₂	268,1929	268,1813	268,1847	268,0619	268,0689	268,1096	268,1327	268,1929	268,1974	268,2219	268,2219
C ₄ H ₆	155,8460	155,8374	155,8393	155,7868	155,7888	155,8005	155,80894	155,8460	155,8473	155,8606	155,8607
C ₄ H ₈ O ₂	307,4706	307,4567	307,46068	307,3242	307,3315	307,3764	307,4014	307,4706	307,4752	307,5031	
C ₅ H ₁₀ O ₂	346,7484	346,7324	346,7369	346,5866	346,5941	346,6433	346,6704	346,7484	346,7533	346,7846	
C ₆ H ₅ OCH ₃	346,4751	346,4566	346,4609	346,3361	346,3413	346,3815	346,3990	346,4751	346,4788	346,5083	
C ₆ H ₆	232,0406	232,0269	232,0300	231,9562	231,9585	231,9815	231,9901	232,0406	232,0425	232,0617	232,0618
CF ₄	437,2474	437,2856	437,2878	437,0777	437,0866	437,1006	437,1346	437,2474	437,2546	437,2977	437,2978
CH ₂ F ₂	238,8403	238,8605	238,8621	238,7563	238,7643	238,7550	238,7809	238,8403	238,8463	238,8696	238,8696
CH ₃ F	139,6465	139,6566	139,6577	139,5980	139,6044	139,5943	139,6112	139,6465	139,6506	139,6641	139,6641
CH ₄	40,4744	40,4727	40,4730	40,4574	40,4578	40,4572	40,4600	40,4744	40,4745	40,4785	40,4785
CHF ₃	338,0457	338,0759	338,0770	337,9208	337,9288	337,9289	337,9600	338,0457	338,0525	338,0856	338,0857
CO	113,2256	113,2202	113,2212	113,1620	113,1648	113,1932	113,2005	113,2256	113,2270	113,2376	113,2377
CO ₂	188,4571	188,4486	188,4504	188,3478	188,3525	188,4004	188,4140	188,4571	188,4596	188,4774	188,4774
F ₂	199,3953	199,4173	199,4176	199,3517	199,3597	199,3251	199,34513	199,3953	199,3999	199,4196	199,4197
H ₂	1,1685	1,1689	1,1690	1,1650	1,1650	1,1634	1,164	1,1685	1,1685	1,1691	1,1691
H ₂ CO ₃	264,8352	264,8256	264,8285	264,6885	264,6971	264,7500	264,7772	264,8352	264,8408	264,8656	264,8657
H ₂ PO ₄ ⁻	643,3293	643,3378	643,3412	643,0055	643,0272	643,1504	643,2205	643,3293	643,3465	643,3999	643,4002
H ₂ SO ₄	699,9509	699,9501	699,9676	699,4722	699,4881	699,7697	699,8169	699,9509	699,9582	700,0251	700,0253
H ₃ PO ₄	643,8738	643,8737	643,8773	643,5331	643,5474	643,7030	643,7528	643,8738	643,8822	643,9363	643,9365

Continuação da tabela											
HCl	460,6723	460,6760	460,6770	460,6370	460,6376	460,6536	460,6578	460,6723	460,6734	460,6797	460,6797
HF	100,3853	100,3992	100,4000	100,3491	100,3599	100,3411	100,36302	100,3853	100,3909	100,4013	100,4014
HPO ₄ ⁻²											
HSO ₄ ⁻	699,4352	699,4420	699,4590	698,9858	699,0049	699,2452	699,3102	699,4352	699,4498	699,5160	699,5163
LiH	8,0514	8,0468	8,0513	8,0496	8,0496	8,0481	8,0486	8,0514	8,0518	8,0525	8,0525
NaCl	622,3335	622,3399	622,3420	622,3075	622,3083	622,3113	622,3168	622,3335	622,3349	622,3431	622,3434
NaH	162,7464	162,7500	162,7503	162,7337	162,7338	162,7389	162,73984	162,7464	162,7468	162,7501	162,7501
O ₂	150,1614	150,157	150,1575	150,0935	150,0995	150,1159	150,1313	150,1614	150,1651	150,1791	150,1793
O ₃	225,2654	225,2586	225,2600	225,1511	225,1606	225,1943	225,2205	225,2654	225,2714	225,2925	225,2928
PH ₃	343,0197	343,0149	343,0157	342,9717	342,9721	343,0027	343,0050	343,0197	343,0202	343,0276	343,0276
PO ₄ ⁻³	641,5671	641,6877	641,6902	641,2954	641,3773	641,3305	641,5339	641,5671	641,6605	641,7009	641,7709
SH ₂	399,2669	399,2686	399,2716	399,2190	399,2196	399,2479	399,2522	399,2669	399,2680	399,2750	399,2751
SiH ₄	291,7583	291,7607	291,7643	291,7203	291,7206	291,7416	291,7424	291,7583	291,7586	291,7663	291,7664
SiO ₂	439,7291	439,7241	439,7346	439,5839	439,5914	439,6446	439,6663	439,7291	439,7332	439,7593	439,7594
SO ₂	548,3933	548,3914	548,4057	548,1322	548,1400	548,2914	548,3175	548,3933	548,3981	548,4365	548,4369
SO ₄ ⁻²	698,6875	698,7148	698,7314	698,2727	698,3050	698,4778	698,4353	698,6875	698,5906	698,7860	698,7874

Fonte: Do autor (2021)

Figura 43: Diferença entre as medidas de energia moleculares calculadas com o funcional BHHLYP

Fonte: Do autor (2021)

Figura 44: Diferença entre as medidas de Energia moleculares calculadas com o funcional PBE0

Fonte: Do autor (2021)

O próximo método utilizado para calcular o valor de energia molecular foi o HF e os resultados obtidos estão descritos na tabela 27, foi possível otimizar a geometria para

todas as moléculas ao utilizar o conjunto de base aMCG-2d1f, porém, como ocorrido com os outros funcionais para cálculos DFT, não houve convergência no cálculo da molécula $\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$ com o conjunto de base aug-pc-3.

As diferenças entre as energias (ΔE) considerando como referência os valores de energia com do conjunto de base aMCG-2d1f, assim como já realizado anteriormente, são expressas pela figura 45 e é possível observar que os conjuntos de base aMCG (2d1f e 3d2f1g), aug-cc-pVTZ, pc-3 e aug-pc-3 apresentam valores semelhantes para a energia, assim como na figura 43.

Dos métodos selecionados para cálculos moleculares, o método MP2 é o mais custoso computacionalmente, por isso ao analisar a tabela 28 percebe-se que não foi possível realizar a otimização de geometria de moléculas muito grandes como $\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$ e $\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$. Além disso, conjuntos de base muito extensos e consequentemente mais custosos, como aMCG-3d2f1g, pc-3 e aug-pc-3, também não puderam ser calculados. Assim como foi observado nos testes atômicos (aniônico, neutro e catiônico), a energia dos métodos HF e pós-HF são menores em módulo que as energias obtidas pelos funcionais DFT, esse é um resultado esperado devido a algumas aproximações ou até mesmo o acréscimo de termos empíricos que podem supervalorizar os valores de energia.

Tabela 27: Resultados de Energia em Hartree para o método HF

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2flg	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3	aug pc-3
BF ₄ ⁻	422,9453	422,9487	422,9495	422,7720	422,7855	422,7433	422,7820	422,9036	422,9126	422,9484	422,9484
BH ₄ ⁻	26,9893	26,9895	26,9897	26,9679	26,9697	26,9723	26,9776	26,9863	26,9874	26,9895	26,9895
CO ₃ ⁻²	262,4217	262,4029	262,4044	262,2321	262,2787	262,2656	262,3495	262,3771	262,4096	262,4275	262,4275
HCO ₃ ⁻	263,2224	263,1980	263,2003	263,0320	263,0485	263,1026	263,1421	263,1943	263,2055	263,2253	263,2253
NO ₂ ⁻	204,1806	204,1675	204,1691	204,0272	204,0507	204,0797	204,1244	204,1536	204,1695	204,1838	204,1838
NO ₃ ⁻	279,0601	279,0400	279,0424	278,8522	278,8710	278,9352	278,9780	279,0303	279,0419	279,0633	279,0633
OH ⁻	75,4126	75,4101	75,4111	75,3418	75,3842	75,3305	75,3962	75,3831	75,4126	75,4172	75,4172
AlF ₂ H	441,6467	441,6384	441,6466	441,5183	441,5258	441,5182	441,5529	441,6156	441,6219	441,6433	441,6433
AlF ₃	540,6384	540,6302	540,6396	540,4616	540,4740	540,4516	540,5049	540,5937	540,6032	540,6363	540,6363
AlFH ₂	342,6483	342,6404	342,6471	342,5655	342,5695	342,5761	342,5935	342,6306	342,6337	342,6437	342,6437
AlH ₃	243,6489	243,6416	243,6464	243,6107	243,6109	243,6317	243,6325	243,6443	243,6445	243,6430	243,6430
BF ₃	323,3566	323,3581	323,3593	323,1888	323,1944	323,2005	323,2219	323,3268	323,3306	323,3592	323,3592
BH ₃	26,4022	26,4021	26,4023	26,3828	26,3828	26,3906	26,3912	26,4002	26,4003	26,4022	26,4022
C ₂ H ₄ O ₂	227,9137	227,8922	227,8949	227,7462	227,7519	227,8233	227,8413	227,8951	227,8990	227,9160	227,9160
C ₃ H ₆ O ₂	266,9648	266,9401	266,9433	266,7730	266,7785	266,8624	266,8811	266,9441	266,9479	266,9674	266,9674
C ₄ H ₆	154,9888	154,9760	154,9781	154,8927	154,8948	154,9344	154,9404	154,9788	154,9802	154,9902	154,9902
C ₄ H ₈ O ₂	306,0149	305,9871	305,9908	305,7983	305,8040	305,8997	305,9198	305,9919	305,9958	306,0178	306,0178
C ₅ H ₁₀ O ₂	345,0652	345,0343	345,0384	344,8236	344,8295	344,9372	344,9586	345,0398	345,0439	345,0684	345,0684
C ₆ H ₅ OCH ₃	344,7241	344,6952	344,6990	344,5148	344,5196	344,6072	344,6210	344,7013	344,7046	344,7269	
C ₆ H ₆	230,7948	230,7762	230,7788	230,6628	230,6653	230,7217	230,7277	230,7805	230,7823	230,7966	230,7966
CF ₄	435,8575	435,8555	435,8574	435,6069	435,6147	435,6667	435,6953	435,8178	435,8237	435,8609	435,8609
CH ₂ F ₂	238,0185	238,0159	238,0172	237,8923	237,8969	237,9117	237,9316	237,9961	238,0003	238,0202	238,0202
CH ₃ F	139,1083	139,1054	139,1063	139,0339	139,0380	139,0449	139,0574	139,0950	139,0979	139,1093	139,1093
CH ₄	40,2164	40,2133	40,2136	40,1882	40,1885	40,1985	40,1995	40,2135	40,2137	40,2168	40,2168
CHF ₃	336,9394	336,9370	336,9386	336,7539	336,7590	336,7904	336,8152	336,9083	336,9134	336,9419	336,9419
CO	112,7906	112,7794	112,7806	112,6985	112,7006	112,7500	112,7553	112,7818	112,7829	112,7917	112,7917
CO ₂	187,7253	187,7059	187,7079	187,5638	187,5678	187,6528	187,6642	187,7099	187,7121	187,7270	187,7270
F ₂	198,7773	198,7779	198,7782	198,7052	198,7109	198,6887	198,7032	198,7580	198,7609	198,7784	198,7784
H ₂	1,1336	1,1334	1,1336	1,1280	1,1280	1,1286	1,1287	1,1330	1,1331	1,1336	1,1336
H ₂ CO ₃	263,7858	263,7603	263,7630	263,5835	263,5897	263,6799	263,7016	263,7638	263,7680	263,7886	263,7886
H ₂ PO ₄ ⁻	641,7153	641,6702	641,6823	641,2869	641,3042	641,4831	641,5429	641,6671	641,6799	641,7214	641,7214
H ₂ SO ₄	698,3001	698,2577	698,2731	697,6800	697,6958	698,0514	698,0965	698,2481	698,2540	698,3099	698,3099
H ₃ PO ₄	642,2623	642,1988	642,2288	641,8231	641,8359	642,0386	642,0852	642,2193	642,2261	642,2683	642,2683

Continuação da tabela											
HCl	460,1119	460,1103	460,1111	460,0657	460,0666	460,0894	460,0926	460,1069	460,1076	460,1071	460,1071
HF	100,0699	100,0697	100,0704	100,0215	100,0278	100,0197	100,0338	100,0585	100,0615	100,0707	100,0707
HPO ₄ ⁻²	640,9583	640,9158	640,9267	640,5503	640,5798	640,7027	640,7926	640,8983	640,9257	640,9655	640,9655
HSO ₄ ⁻	697,7868	697,7453	697,7604	697,1952	697,2117	697,5306	697,5860	697,7309	697,7414	697,7965	697,7965
LiH	7,9833	7,9821	7,9863	7,9846	7,9847	7,9836	7,9842	7,9866	7,9868	7,9867	7,9867
NaCl	621,4568	621,4580	621,4602	621,4254	621,4263	621,4338	621,4386	621,4537	621,4549	621,4460	621,4460
NaH	162,3896	162,3929	162,3933	162,3770	162,3771	162,3840	162,3847	162,3908	162,3911	162,3848	162,3848
O ₂	149,6077	149,5918	149,5931	149,5096	149,5141	149,5478	149,5612	149,5945	149,5972	149,6091	149,6091
O ₃	224,3768	224,3529	224,3550	224,2110	224,2187	224,2807	224,3060	224,3567	224,3614	224,3794	224,3794
PH ₃	342,4933	342,4792	342,4828	342,4235	342,4240	342,4704	342,4721	342,4877	342,4882	342,4891	342,4891
PO ₄ ⁻³	639,9960	639,9635	639,9744	639,6016	639,6601	639,6922	639,8439	639,9112	639,9731	640,0079	640,0079
SH ₂	398,7188	398,7144	398,7176	398,6541	398,6550	398,6945	398,6980	398,7131	398,7140	398,7144	398,7144
SiH ₄	291,2661	291,2624	291,2671	291,2003	291,2006	291,2428	291,2431	291,2606	291,2609	291,2621	291,2621
SiO ₂	438,7434	438,7190	438,7309	438,5327	438,5387	438,6283	438,6510	438,7207	438,7241	438,7419	438,7419
SO ₂	547,3215	547,2920	547,3074	546,9592	546,9662	547,1751	547,2007	547,2896	547,2937	547,3250	547,3250
SO ₄ ⁻²	697,0508	697,0129	697,0283	696,4932	696,5172	696,7740	696,8577	696,9855	697,0092	697,0617	697,0617

Fonte: Do autor (2021)

Figura 45: Diferença entre as medidas de Energia moleculares calculadas com método HF

Fonte: Do autor (2021)

Tabela 28: Resultados de Energia em Hartree para o método MP2

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3
BF_4^-	424,0970	423,9703	424,0256	423,3772	423,4066	423,5801	423,6994	424,0225	424,0638	424,1787
BH_4^-	27,1575	27,1519	27,1629	27,0517	27,0545	27,1071	27,1213	27,1521	27,1564	27,16514
CO_3^{2-}	263,3178	263,2533	263,2969	262,7268	262,8105	262,9289	263,0994	263,2420	263,3164	263,3844
HCO_3^-	264,1098	264,0333	264,0758	263,5330	263,5666	263,7777	263,8749	264,0592	264,0952	264,1672
NO_2^-	204,8817	204,8281	204,8600	204,4383	204,4793	204,6150	204,7095	204,8341	204,8744	
NO_3^-	280,0036	279,9243	279,9672	279,4061	279,4433	279,6575	279,7616	279,9483	279,9888	
OH^-	75,6933	75,6798	75,6946	75,4825	75,5486	75,5255	75,6370	75,6475	75,7023	75,72052
AlF_2H	442,2486	442,1687	442,2072	441,8374	441,8529	441,9604	442,0332	442,2014	442,2229	442,2846
AlF_3	541,4922	541,3815	541,4312	540,9172	540,9405	541,0778	541,1839	541,4247	541,4557	541,5473
AlFH_2	342,9976	342,9485	342,9756	342,7473	342,7553	342,8351	342,8742	342,9704	342,9823	
AlH_3	243,7453	243,7271	243,7427	243,6552	243,6556	243,7085	243,7133	243,7382	243,7403	243,7426
BF_3	324,2186	324,1349	324,1736	323,6525	323,6641	323,8385	323,9052	324,1665	324,1889	324,2778
BH_3	26,5173	26,5144	26,5203	26,4403	26,4405	26,4825	26,4863	26,5135	26,5150	26,5227
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	228,7290	228,6669	228,7080	228,2080	228,2215	228,4613	228,5151	228,6950	228,7143	228,7776
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	267,9564	267,8870		267,3318	267,3455	267,6434	267,7031	267,9181	267,9400	
C_4H_6	155,6472	155,6157	155,6577	155,2672	155,2719	155,4677	155,4934	155,6278	155,6383	155,6815
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	307,1829	307,1061		306,4544	306,4689	306,8237	306,8903	307,1400	307,1648	
$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$										
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$										
C_6H_6	231,7578	231,7094		231,2119	231,2184	231,5038	231,5372	231,7293	231,7445	
CF_4	437,0360	436,9052	436,9595	436,2419	436,2585	436,5346	436,6327	436,9661	436,9996	437,1177
CH_2F_2	238,7073	238,6386	238,6707	238,2593	238,2713	238,4219	238,4841	238,6679	238,6887	238,7539
CH_3F	139,5517	139,5141	139,5353	139,2681	139,2770	139,3784	139,4164	139,5285	139,5415	139,5805
CH_4	40,4168	40,4098	40,4203	40,2923	40,2929	40,3594	40,3671	40,4116	40,4144	40,42739
CHF_3	337,8738	337,7739	337,8170	337,2550	337,2686	337,4794	337,5609	337,8190	337,8464	337,938
CO	113,1518	113,1204	113,1373	112,9276	112,9319	113,0366	113,0547	113,1357	113,1424	
CO_2	188,3364	188,2812	188,3087	187,9445	187,9526	188,1333	188,1693	188,3084	188,3216	
F_2	199,3078	199,2469	199,2674	199,0007	199,0104	199,0795	199,1266	199,2746	199,2909	
H_2	1,1654	1,1647	1,1659	1,1459	1,1459	1,1550	1,1560	1,1647	1,1650	
H_2CO_3	264,6578	264,5788	264,6200	264,0759	264,0912	264,3512	264,4160	264,6170	264,6391	264,7124
H_2PO_4^-	642,8590	642,7556	642,8053	641,9183	641,9524	642,3448	642,4855	642,7780	642,8238	
H_2SO_4	699,4660	699,3388	699,4182	698,3409	698,3661	698,9389	699,0512	699,3830	699,4163	
H_3PO_4	643,3911	643,2860	643,3347	642,4424	642,4658	642,8992	643,0108	643,3199	643,3527	

Continuação da tabela												
HCl	460,3244	460,3087	460,3319	460,1232	460,1240	460,2357	460,2516	460,3094	460,3151			
HF	100,3496	100,3172	100,3297	100,1652	100,1769	100,2210	100,2558	100,3298	100,3409			
HPO_4^{-2}	642,1166	642,0192	642,0456	641,1897	641,2477	641,5599	641,7550	642,0160	642,0893			
HSO_4^-	698,9606	698,8351	698,9156	697,8587	697,8906	698,4116	698,5500	698,8693	698,9138			
LiH	8,0089	8,0053	8,0140	7,9977	7,9978	8,0060	8,0084	8,0138	8,0150	8,015355		
NaCl	621,6681	621,6505	621,6808	621,4801	621,4810	621,5748	621,5965	621,6546	621,6615	621,6653		
NaH	162,4164	162,4178	162,4215	162,3912	162,3913	162,4062	162,4096	162,4181	162,4195	162,4133		
O ₂	150,0868	150,0398	150,0573	149,8112	149,8187	149,9229	149,9555	150,0630	150,0747	150,1143		
O ₃	225,1559	225,0869	225,1149	224,7147	224,7291	224,9003	224,9577	225,1189	225,1393	225,1987		
PH ₃	342,6680	342,4787	342,6599	342,4910	342,4918	342,6047	342,6135	342,6575	342,6612	342,6693		
PO_4^{-3}	641,1697	641,0946	641,1461	640,2418	640,3526	640,5354	640,8343	641,0300	641,1647	641,2600		
SH ₂	398,9163	398,8760	398,9175	398,7172	398,7183	398,8384	398,8522	398,9034	398,9085	398,9187		
SiH ₄	291,4128	291,4005	291,4183	291,2659	291,2664	291,3591	291,3647	291,4038	291,4066	291,4141		
SiO ₂	439,3430	439,2819	439,3209	438,9134	438,9270	439,1043	439,1573	439,3074	439,3244	439,3742		
SO ₂	547,9935	547,9117	547,9695	547,3862	547,3997	547,6995	547,7616	547,9447	547,9642	548,0313		
SO_4^{-2}	698,2304	698,1125	698,2351	697,1487	697,1986	697,6397	697,8317	698,1219	698,1925	698,3152		

Fonte: Do autor (2021)

4.3.3 Momento Dipolo

Uma ligação química entre átomos é a combinação linear entre as funções de onda os descrevem, de forma que haja uma região no espaço em comum a esses átomos, os orbitais moleculares. No caso de moléculas formadas por átomos iguais, a nuvem eletrônica se distribuir uniformemente no espaço, entretanto, no caso de moléculas composta por heteroátomos, essa tende a se concentrar preferencialmente próxima aos átomos mais eletronegativos, resultando em uma carga residual ao longo das ligações moleculares, mesmo que a carga total da molécula seja zero, o momento dipolo é a resultante da soma das cargas residuais.²

$$\mu = \sum_i^n Q_i \vec{r} \quad (4.3)$$

A equação 4.3, é a expressão clássica do momento dipolo (μ) que depende do vetor posição ($\vec{r}$) das cargas Q_i . Reescrevendo a forma clássica para o formato de um operador da mecânica quântica, no qual o primeiro termo refere-se a contribuição dos núcleos e o segundo à dos elétrons:²

$$\langle \mu \rangle = \sum_{A=1}^{n_n} e Z_A \vec{r} - e \sum_{i=1}^{n_e} \int \vec{r} |\psi_i(i)|^2 d^3 \vec{r}_i \quad (4.4)$$

Por mais que seja intuitivo associar o momento dipolo e densidade eletrônica, essas propriedades não são a iguais, uma vez que o momento dipolo total pode ser igual a zero a depender da geometria da molécula. Essa propriedade e as suas variantes como quadrupolo ou polarizabilidade, são usadas na literatura para avaliar a eficiência dos funcionais no método DFT.⁶²

Do conjunto de moléculas analisadas, aquela cujo valor de momento dipolo mais destoa do valor experimental almejado em todos os métodos computacionais aplicados, foi a H_2SO_4 , como mostrado na figura 47. Ao comparar os resultados de momento dipolo para o funcional B3LYP-sp e o B3LYP-opt, tabelas 29 e 30 respectivamente, observa-se que no caso B3LYP-opt a molécula em questão apresenta problemas de convergência para os conjuntos de base 6-311G, 6-311G+, cc-pVTZ e aug-cc-pVTZ. Nos casos dos conjuntos de base que alcançaram a convergência, utilizar o próprio conjunto de base para otimizar a geometria (B3LYP-opt) trouxe uma pequena melhora nos resultados de momento dipolo para os conjuntos MCG (3,932D para 3,892D) e pc-3 (3,897D para 3,879D) e uma grande melhora ao utilizar o conjunto de base cc-pVDZ (3,907D para 2,421D) e aug-cc-pVDZ (3,860D para 2,896D), $\mu_{exp} = 2,7250\text{D}$, indicando que os conjuntos de base MCG, aMCG (2d1f e 3d2f1g) e pc-3 podem não estar descrevendo a geometria dessa molécula com precisão. As moléculas CO_3^{2-} , CO, H_3PO_4 e PO_4^{3-} apresentaram comportamentos anômalos e serão discutidas a seguir.

A molécula PO_4^{-3} tem como átomo central o fósforo que quando neutro possui 15 elétrons ($1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2$ e $3p^3$), onde um par de elétrons emparelhados no orbital tipo "s" é compartilhado e os outros 3 orbitais tipo "p" semi-preenchidos permitem a realização de ligações simples. Considerando que uma ligação dupla é mais curta que a simples, esses orbitais deveriam se organizar para assumir a geometria pirâmide trigonal ou um tetraédrico levemente distorcido, porém, como na prática não tem como afirmar categoricamente que a ligação dupla estará no oxigênio 4 (como ilustrado na figura 46). O cálculo considera que todas as ligações tem o mesmo comprimento, como se fossem ligações conjugadas, tornando o momento dipolo total da molécula PO_4^{-3} igual a zero. Entretanto, o estudo utilizando o funcional B3LYP-sp resultou que para os conjuntos de base aMCG (2d1f e 3d2f1g) o valor de momento dipolo é 3,112D e 1,488D, respectivamente, ao passo que para os outros conjuntos de base o valor de $\mu = 0$.

Figura 46: Geometria, PO_4^{-3} , calculada pelo funcional B3LYP-sp

Fonte: Do autor (2021)

Analisando a situação na qual o funcional B3LYP-opt foi utilizado, é possível observar que para o conjunto de base aMCG-2d1f a situação é amenizada, $\mu = 0,049\text{D}$ e em oposição, à do conjunto aMCG-3d2f1g foi acentuada, $\mu = 3,263\text{D}$, enquanto os outros conjuntos de base mantiveram o resultado de $\mu = 0$, independente se foram submetidos a cálculo de otimização de geometria ou apenas tipo *single point*. O funcional PBE0, (33), também apresentou esse comportamento atípico, porém neste caso, todos os conjuntos de base apresentaram momento dipolo diferente de zero, destacando os casos mais expressivos; aug-pc-3 ($\mu = 1,895\text{D}$), aMCG-2d1f ($\mu = 2,908\text{D}$) e aMCG-3d2f1g ($\mu = 2,963\text{D}$).

Circunstância como a descrita acima ocorre de forma semelhante para os funcionais

B3LYP e PBE0 com a molécula CO_3^{-2} , no qual o momento dipolo igual a zero é esperado devido ao favorecimento da geometria trigonal planar em consequência da hibridização tipo " sp^2 " do átomo de carbono. Todavia, momento dipolo diferente de zero foi observado para o funcional B3LYP-sp para todos os conjuntos de base, sobressaindo os resultados com os conjuntos aMCG-3d2f1g ($\mu = 0,347$)D, aMCG-2d1f ($\mu = 0,390$)D e aug-pc-3 ($\mu = 1,183$)D. Quanto o funcional B3LYP-opt, apenas os conjuntos de base aMCG (2d1f e 3d2f1g) que resultaram em momento dipolo diferente de zero e com o funcional PBE0, apenas os conjuntos de base aMCG-2d1f ($\mu = 0,220$)D, aMCG-3d2f1g ($\mu = 0,513$)D e aug-pc-3 ($\mu = 0,834$)D.

É possível imaginar que no caso do funcional B3LYP-sp a geometria inicial sugerida não foi a ideal, apesar de ser a única que possibilitou a convergência dos cálculos, isso porque todos os cálculos com a geometria obtida pelo conjunto de base aMCG-2d1f obtiveram resultados anômalos, enquanto no caso B3LYP-opt, as geometrias otimizadas com os outros conjuntos de base se comportaram como o esperado, indicando uma má predição da geometria para essa molécula para o conjuntos de base aMCG (2d1f e 3d2f1g) com o funcional B3LYP.

Ao comparar o resultado de duas moléculas semelhantes, CO_3^{-3} e CO, utilizando o funcional PBE0, observa-se que apesar da segunda molécula apresentar uma geometria mais simples, os resultados obtidos de momento dipolo foram próximos ao alcançado experimentalmente para ambos os conjuntos de base aMCG. Já o resultado para a molécula CO_3^{-3} é atípico apenas para ambos os conjuntos de base aMCG, ao submeter a geometria calculada pelo conjunto de base aMCG-2d1f à cálculos com os outros conjuntos de base o resultado é exatamente o esperado, indicando que o conjunto de base aMCG-2d1f conseguiu prever corretamente a geometria para a molécula CO_3^{-3} , apesar dos desvios dos valores de momento dipolo.

Ao utilizar o funcional BHHLYP para prever a molécula CO o momento dipolo obtido foi aproximadamente igual a zero para os conjuntos de base MCG ($\mu = 0,004$)D, aMCG-3d2f1g ($\mu = 0,006$)D, aug-cc-pVDZ ($\mu = 0,007$)D, aug-cc-pVTZ ($\mu = 0,001$)D, pc-3 ($\mu = 0,001$)D e aug-pc-3 ($\mu = 0,003$)D e os melhores resultados foram obtidos pelos conjuntos 6-311G e 6-311G+, ambos com $\mu = 0,149$ D ($\mu_{exp} = 0,112$)D. Esse não é um resultado esperado, pois essa é uma molécula composta por dois átomos diferentes, que a pesar de não apresentarem uma grande diferença de eletronegatividade entre si, é diferente de zero, e além disso, os melhores resultados foram obtidos através do conjunto de base mais simples, algo contra intuitivo. No entanto, esse comportamento foi observado apenas para esse funcional, em contra ponto, o funcional PBE0 com o conjunto de base aMCG-3d2f1g atingiu o valor de $\mu = 0,110$ D, indicando que não há um problema com ambos os conjuntos de base gerado aMCG.

O valor de momento dipolo experimental para a molécula H_3PO_4 não foi encontrado,

portanto a comparação feita foi entre os resultados apresentados que, em geral, variaram entre os valores $2,979\text{D} < \mu < 3,691\text{D}$ para a maioria dos conjuntos de base em diferentes metodologias. Entretanto, o conjunto de base aMCG-2d1f apresentou valores de momento dipolo entre $7,20\text{D} < \mu < 8,06\text{D}$ para os funcionais BLYP, B3LYP-sp, BHHLYP e ainda com método HF, apenas concordando com os outros resultados com o funcional PBE0 ($\mu = 3,266\text{D}$) e o método MP2 ($\mu = 3,604\text{D}$).

O funcional B3LYP-sp, foi a única forma que todos os conjuntos de base apresentassem resultados entre $7,287\text{D} < \mu < 8,281\text{D}$, porém quando a geometria foi otimizada para cada conjunto de base com o funcional B3LYP-opt, os únicos resultados anômalos foram para os conjuntos aMCG-2d1f ($\mu = 7,485\text{D}$) e aMCG-3d2f1g ($\mu = 7,373\text{D}$), enquanto os outros conjuntos de base apresentaram valores entre $2,979\text{D} < \mu < 3,491\text{D}$), indicando a junção entre o funcional B3LYP e o conjunto de base aMCG-2d1f não previu a geometria da molécula H_3PO_4 corretamente, porém, não é possível afirmar que há problemas nos conjuntos de base aMCG, uma vez que o funcional PBE0 e o método MP2 não apresentaram valores discrepantes e os funcionais BLYP, BHHLYP e método HF só apresentaram resultados divergentes para o conjunto aMCG-2d1f, ao passo que obtiveram valores comparáveis para os outros conjuntos de base utilizando a geometria calculada pelo conjunto aMCG-2d1f.

Em vias gerais, os conjuntos de base aMCG (2d1f e 3d2f1g) geraram valores comparáveis de momento dipolo para a maioria dos métodos computacionais aplicados, e as maiores discrepâncias entre esses conjuntos foram observadas nas moléculas H_3PO_4 e PO_4^{-3} .

Tabela 29: Valores de momento dipolo em Debye usando o funcional B3LYP-sp

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3	aug pc-3	Exp
CO_3^{-2}	0,099	0,39	0,347	0,102	0,094	0,098	0,095	0,096	0,092	0,101	1,183	
HCO_3^-	2,687	2,715	2,638	2,71	2,859	2,467	2,629	2,598	2,624	2,643	2,618	
NO_2^-	0,284	0,458	0,423	0,211	0,344	0,27	0,382	0,274	0,407	0,355	0,418	
OH^-	1,462	1,669	1,439	1,57	2,046	1,143	1,413	1,325	1,386	1,474	1,332	1,660
AlF_2H	1,439	1,512	1,446	1,828	2,027	1,421	1,5	1,363	1,458	1,441	1,437	
AlFH_2	1,433	1,558	1,442	1,812	2,105	1,423	1,483	1,348	1,454	1,444	1,436	
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	4,422	4,476	4,404	4,784	4,955	4,122	4,389	4,296	4,391	4,398	4,39	
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	4,301	4,349	4,287	4,66	4,835	3,99	4,27	4,173	4,273	4,279	4,273	
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	4,256	4,304	4,243	4,637	4,807	3,95	4,225	4,127	4,23	4,235		
$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$	4,323	4,367	4,312	4,681	4,861	3,995	4,296	4,19	4,299	4,304		
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$	1,27	1,303	1,257	1,624	1,666	1,235	1,253	1,229	1,247	1,251		
CH_2F_2	1,985	2,022	1,975	2,275	2,45	1,804	1,973	1,883	1,967	1,968	1,964	1,970
CHF_3	1,898	1,948	1,875	2,189	2,349	1,755	1,868	1,815	1,864	1,87	1,862	1,850
CHF_3	1,652	1,672	1,64	1,907	2,023	1,494	1,636	1,569	1,636	1,636	1,632	1,650
CO	0,092	0,077	0,091	0,012	0,049	0,211	0,1	0,128	0,096	0,095	0,097	0,112
H_2CO_3	0,294	0,253	0,309	0,363	0,335	0,213	0,315	0,289	0,323	0,319	0,324	
H_2PO_4^-	3,895	3,973	3,863	4,239	4,239	3,693	3,82	3,845	3,844	3,876	3,846	
H_2SO_4	3,932	3,964	3,859	4,36	4,36	3,907	3,86	3,942	3,887	3,897	3,883	2,725
H_3PO_4	7,394	7,49	7,373	8,281	8,281	7,31	7,287	7,365	7,34	7,366	7,347	
HCl	1,163	1,283	1,128	1,797	1,797	1,327	1,144	1,207	1,116	1,12	1,095	1,080
HF	1,859	1,903	1,819	2,278	2,278	1,813	1,799	1,833	1,812	1,821	1,811	
HPO_4^{-2}	3,004		1,477	3,218	3,218	2,707	2,935	2,91	2,963	3,004	2,952	
HSO_4^-	2,485	2,526	2,43	2,757	2,665	2,358	2,44	2,475	2,459	2,473	2,458	
LiH	5,687	5,741	5,732	5,697	5,698	5,647	5,714	5,665	5,704	5,703	5,705	5,880
NaCl	8,939	8,97	8,787	9,52	9,42	8,599	8,894	8,665	8,835	8,779	8,739	8,971
NaH	5,916	6,041	6,022	6,083	6,088	6,025	6,054	6,008	6,052	6,018	6,017	6,400
O_3	0,687	0,683	0,659	0,5	0,608	0,612	0,651	0,639	0,658	0,647	0,657	0,530
PH_3	0,597	0,762	0,591	1,28	1,312	0,749	0,631	0,634	0,595	0,589	0,568	0,580
PO_4^{-3}	0	3,112	1,489	0	0	0	0	0	0	0		
SH_2	1,04	1,254	1,003	1,837	1,849	1,224	1,03	1,089	0,99	0,998	0,962	
SO_2	1,71	1,837	1,738	2,169	2,181	1,7	1,713	1,721	1,711	1,711	1,687	1,630

Tabela 30: Valores de momento dipolo em Debye usando o funcional B3LYP-opt

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3	Exp
CO_3^{-2}	0	0,39	0,348	0	0	0	0	0	0	0	
HCO_3^-	2,655	2,715	2,636	2,622	2,802	2,379	2,657	2,526	2,611	2,625	
NO_2^-	0,292	0,458	0,423	0,305	0,405	0,306	0,389	0,293	0,405	0,358	
OH^-	1,463	1,669	1,439	1,452	2,003	1,066	1,409	1,314	1,386	1,476	1,6600
AlF_2H	1,443	1,512	1,447	2,157	2,383	1,578	1,664	1,433	1,532	1,433	
AlFH_2	1,433	1,557	1,441	2,095	2,509	1,595	1,655	1,403	1,512	1,433	
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	4,416	4,476	4,404	4,889	5,071	4,135	4,419	4,29	4,391	4,39	
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	4,295	4,349	4,286	4,762	4,945	3,994	4,296	4,167	4,274	4,271	
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	4,252	4,304	4,244	4,746	4,923	3,955	4,255	4,122	4,233	4,228	
$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$	4,317	4,367	4,31	4,785	4,972	3,996	4,325	4,183	4,3	4,295	
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$	1,274	1,303	1,256	1,704	1,745	1,232	1,26	1,231	1,253	1,253	
CH_2F_2	1,985	2,022	1,975	2,483	2,703	1,782	2,018	1,872	1,974	1,968	1,9700
CH_3F	1,898	1,948	1,875	2,381	2,612	1,717	1,909	1,798	1,872	1,869	1,8500
CHF_3	1,651	1,672	1,64	2,082	2,208	1,493	1,671	1,561	1,639	1,635	1,6500
CO	0,095	0,077	0,091	0,085	0,125	0,18	0,069	0,125	0,095	0,102	0,1120
H_2CO_3	0,279	0,253	0,309	0,227	0,172	0,163	0,308	0,258	0,305	0,305	
H_2PO_4^-	3,878	3,978	3,865	4,107	3,813	3,333	3,676	3,738	3,809	3,876	
H_2SO_4	3,892	3,964	3,859			2,421	2,8958			3,879	2,7250
H_3PO_4	3,201	7,49	7,373	3,465	3,491	2,979	3,139	3,187	3,147	3,19	
HCl	1,16	1,283	1,128	3,465	3,491	2,979	3,139	3,187	3,147	1,116	1,0800
HF	1,858	1,903	1,819	2,216	2,296	1,817	1,803	1,831	1,812	1,818	
HPO_4^{-2}	2,602	1,342	0	2,359	2,44	1,859	2,422	2,336	2,582	2,63	
HSO_4^-	2,442	2,526	2,431	2,163	2,11	2,067	2,27	2,37	2,392	2,449	
LiH	5,689	5,741	5,732	5,716	5,717	5,68	5,746	5,677	5,716	5,714	5,8800
NaCl	8,924	8,97	8,789	9,701	9,594	8,601	8,935	8,687	8,858	8,768	8,971
NaH	5,911	6,041	6,021	6,102	6,107	6,032	6,045	6,014	6,055		6,4000
O_3	0,69	0,683	0,659	0,44	0,53	0,616	0,655	0,642	0,66	0,652	0,5300
PH_3	0,595	0,762	0,591	1,227	1,25	0,71	0,6	0,625	0,588	0,589	0,5800
PO_4^{-3}	0	0,049	3,263	0	0	0	0	0	0	0	
SH_2	1,04	1,254	1,003	1,797	1,809	1,219	1,028	1,089	0,99	0,998	
SO_2	1,748	1,837	1,738	2,602	2,696	1,9	1,918	1,811	1,807	1,712	1,6300

Fonte: Do autor (2021)

Tabela 31: Valores de momento dipolo em Debye usando o funcional BLYP

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3	aug pc-3	Exp
HCO ₃ ⁻	2,402	2,424	2,350	2,398	2,576	2,157	2,338	2,313	2,338	2,359	2,328	
NO ₂ ⁻	0,217	0,461	0,433	0,127	0,276	0,192	0,359	0,213	0,359	0,326	0,445	
OH ⁻	1,383	1,636	1,391	1,452	1,990	1,019	1,358	1,232	1,358	1,423	1,290	1,660
AlF ₂ H	1,422	1,496	1,442	1,692	1,944	1,307	1,479	1,319	1,479	1,432	1,428	
AlFH ₂	1,430	1,540	1,451	1,676	2,030	1,330	1,477	1,320	1,477	1,449	1,441	
C ₂ H ₄ O ₂	4,296	4,357	4,285	4,587	4,808	3,934	4,265	4,149	4,265	4,279	4,270	
C ₃ H ₆ O ₂	4,185	4,240	4,177	4,470	4,697	3,810	4,158	4,034	4,158	4,170	4,164	
C ₄ H ₈ O ₂	4,141	4,195	4,136	4,447	4,669	3,771	4,115	3,989	4,115	4,128	4,128	
C ₅ H ₁₀ O ₂	4,214	4,265	4,210	4,495	4,729	3,819	4,192	4,057	4,192	4,203	4,203	
C ₆ H ₅ OCH ₃	1,240	1,275	1,225	1,542	1,612	1,169	1,223	1,187	1,223			
CH ₂ F ₂	1,956	1,998	1,945	2,168	2,386	1,702	1,944	1,829	1,944	1,943	1,938	1,970
CH ₃ F	1,891	1,947	1,868	2,112	2,316	1,679	1,861	1,782	1,861	1,867	1,857	1,850
CHF ₃	1,616	1,640	1,605	1,804	1,953	1,401	1,600	1,515	1,600	1,605	1,599	1,650
CO	0,150	0,137	0,148	0,077	0,034	0,297	0,157	0,193	0,157	0,153	0,155	0,112
H ₂ CO ₃	0,306	0,253	0,333	0,316	0,298	0,243	0,333	0,303	0,333	0,333	0,338	
H ₂ PO ₄ ⁻	3,696	3,775	3,658	4,131	4,005	3,443	3,605	3,633	3,605	3,677	3,642	
H ₂ SO ₄	3,722	3,751	3,681	4,308	4,088	3,665	3,637	3,728	3,637	3,689	3,674	2,725
H ₃ PO ₄	3,205	7,207	3,197	3,258	3,150	3,058	3,152	3,178	3,152	3,202	3,194	
HCl	1,139	1,261	1,100	1,765	1,757	1,286	1,109	1,181	1,109	1,095	1,065	1,080
HF	1,833	1,877	1,786	2,151	2,241	1,765	1,760	1,798	1,760	1,790	1,776	
HSO ₄ ⁻	2,177	2,216	2,158	2,433	2,328	2,023	2,123	2,167	2,123	2,170	2,152	
LiH	5,504	5,555	5,593	5,592	5,593	5,540	5,602	5,559	5,602	5,597	5,602	5,880
NaCl	8,736	8,736	8,586	9,192	9,113	8,236	8,687	8,392	8,687	8,550	8,526	8,971
NaH	5,549	5,688	5,669	5,716	5,722	5,658	5,689	5,641	5,689	5,661		6,400
O ₃	0,627	0,628	0,606	0,442	0,552	0,549	0,604	0,577	0,604	0,592	0,607	0,530
PH ₃	0,539	0,719	0,533	1,227	1,257	0,694	0,569	0,579	0,569	0,530	0,505	0,580
SH ₂	1,002	1,220	0,963	1,782	1,794	1,169	0,984	1,049	0,984	0,960	0,918	
SO ₂	1,656	1,771	1,657	2,027	2,062	1,591	1,661	1,652	1,661	1,663	1,637	1,630

Fonte: Do autor (2021)

Tabela 32: Valores de momento dipolo em Debye usando o funcional BHHLYP

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3	aug pc-3	Exp
HCO ₃ ⁻	2,822	2,853	2,777	2,978	2,978	2,679	2,764	2,763	2,759	2,772	2,758	
NO ₂ ⁻	0,390	0,503	0,462	0,352	0,352	0,393	0,445	0,374	0,450	0,423	0,448	
OH ⁻	1,538	1,704	1,495	1,678	1,678	1,264	1,477	1,416	1,445	1,529	1,411	1,660
AlF ₂ H		1,526	1,470	1,980	1,980	1,558	1,531	1,413	1,480	1,459	1,455	
AlFH ₂	1,437	1,570	1,447	1,959	1,959	1,529	1,492	1,377	1,454	1,441	1,434	
C ₂ H ₄ O ₂	4,613	4,613	4,545	4,996	4,996	4,324	4,531	4,457	4,531	4,536	4,529	
C ₃ H ₆ O ₂	4,479	4,479	4,418	4,869	4,869	4,188	4,404	4,328	4,404	4,409	4,404	
C ₄ H ₈ O ₂	4,434	4,432	4,374	4,846	4,846	4,146	4,357	4,279	4,359	4,364		
C ₅ H ₁₀ O ₂	4,491	4,491	4,437	4,887	4,887	4,189	4,422	4,339	4,422	4,426		
C ₆ H ₅ OCH ₃	1,335	1,336	1,289	1,714	1,714	1,311	1,288	1,276	1,283	1,286		
CH ₂ F ₂	2,036	2,068	2,022	2,406	2,406	1,930	2,025	1,956	2,017	2,017	2,013	1,970
CH ₃ F	1,928	1,972	1,903	2,287	2,287	1,855	1,900	1,867	1,894	1,898	1,892	1,850
CHF ₃	1,700	1,717	1,685	2,026	2,026	1,601	1,686	1,633	1,683	1,682	1,678	1,650
CO	0,004	0,021	0,006	0,149	0,149	0,088	0,007	0,028	0,001	0,001	0,003	0,112
H ₂ CO ₃	0,350	0,312	0,369	0,352	0,352	0,252	0,361	0,343	0,373	0,371	0,374	
H ₂ PO ₄ ⁻	4,168	4,180	4,074	4,596	4,596	3,945	4,044	4,062	4,059	4,084	4,058	
H ₂ SO ₄	3,361	4,118	4,052	4,773	4,773	4,085	4,031	4,098	4,047	4,049	4,038	2,725
H ₃ PO ₄	0,517	7,777	3,276	3,280	3,280	3,148	3,253	3,258	3,273	3,276	3,270	
HCl	1,187	1,302	1,157	1,843	1,843	1,363	1,181	1,232	1,149	1,145	1,127	1,080
HF	1,888	1,929	1,856	2,254	2,254	1,860	1,844	1,869	1,850	1,855	1,849	
HPO ₄ ⁻²	3,005	3,056	2,934	3,145	3,145	2,693	2,901	2,852	2,918	2,938	2,917	
HSO ₄ ⁻	2,782	2,823	2,762	3,089	3,089	2,685	2,747	2,774	2,757	2,765	2,752	5,880
LiH	5,841	5,904	5,826	5,789	5,789	5,735	5,805	5,750	5,786	5,786	5,786	8,971
NaCl	9,106	9,171	8,977	9,807	9,807	8,908	9,068	8,892	9,023	8,972	8,924	6,400
NaH	6,300	6,396	6,378	6,456	6,456	6,387	6,415	6,373	6,416	6,373	6,370	0,530
O ₃	0,768	0,758	0,728	0,592	0,592	0,702	0,718	0,724	0,728	0,722	0,727	0,580
PH ₃	0,657	0,791	0,616	1,300	1,300	0,785	0,697	0,684	0,661	0,651	0,637	
SH ₂	1,076	1,277	1,039	1,877	1,877	1,265	1,077	1,122	1,035	1,034	1,007	
SO ₂	1,934	1,934	1,788	2,365	2,365	1,840	1,790	1,814	1,786	1,785	1,762	1,630

Fonte: Do autor (2021)

Tabela 33: Valores de momento dipolo em Debye usando o funcional PBE0

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3	aug pc-3	Exp
CO_3^{-2}	0,000	0,220	0,513	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,834	
HCO_3^-	2,675	2,787	2,708	2,815	2,938	2,574	2,700	2,675	2,694	2,712	2,689	
NO_2^-	0,259	0,432	0,396	0,210	0,338	0,269	0,359	0,259	0,382	0,331	0,388	
OH^-	1,355	1,668	1,438	1,642	2,073	1,212	1,426	1,355	1,390	1,474	1,337	1,660
AlF_2H	1,346	1,480	1,417	1,853	2,021	1,450	1,475	1,346	1,424	1,404	1,401	
AlFH_2	1,336	1,526	1,419	1,847	2,106	1,447	1,462	1,336	1,426	1,413	1,406	
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	4,311	4,475	4,407	4,841	4,974	4,189	4,393	4,311	4,392	4,399	4,391	
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	4,179	4,340	4,279	4,703	4,842	4,047	4,265	4,179	4,265	4,270	4,264	
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	4,131	4,293	4,234	4,684	4,813	4,006	4,218	4,131	4,220	4,225	0,000	
$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$	4,189	4,351	4,297	4,719	4,859	4,046	4,282	4,189	4,283	4,287	0,000	
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$	1,210	1,276	1,228	1,638	1,660	1,251	1,228	1,210	1,221	0,000	0,000	
CH_2F_2	1,820	1,946	1,899	2,248	2,395	1,791	1,904	1,820	1,894	1,894	1,891	1,970
CH_3F	1,748	1,867	1,793	2,157	2,287	1,736	1,793	1,748	1,784	1,790	1,782	1,850
CHF_3	1,520	1,617	1,584	1,889	1,984	1,483	1,585	1,520	1,582	1,582	1,577	1,650
CO	0,148	0,099	0,110	0,004	0,036	0,199	0,123	0,148	0,117	0,116	0,118	0,112
H_2CO_3	0,317	0,283	0,344	0,363	0,325	0,228	0,337	0,317	0,349	0,346	0,350	
H_2PO_4^-	3,853	3,947	3,859	4,376	4,253	3,739	3,824	3,853	3,843	3,872	3,843	
H_2SO_4	3,946	3,963	3,897	4,591	4,380	3,939	3,866	3,946	3,891	3,898	3,885	2,725
H_3PO_4	3,236	3,266	3,252	3,290	3,208	3,135	3,220	3,236	3,247	3,254	3,247	
HCl	1,228	1,306	1,150	1,855	1,848	1,375	1,174	1,228	1,139	1,142	1,118	1,080
HF	1,830	1,893	1,814	2,220	2,284	1,822	1,800	1,830	1,807	1,815	1,806	
HPO_4^{-2}	2,878	3,015	2,934	3,180	3,178	2,713	2,901	2,878	2,923	2,957	2,916	
HSO_4^-	2,566	2,611	2,552	2,859	2,766	2,477	2,530	2,566	2,546	2,557	2,542	
LiH	5,707	5,823	5,772	5,735	5,736	5,692	5,747	5,707	5,740	5,738	5,741	5,880
NaCl	8,775	9,073	8,871	9,665	9,556	8,810	8,968	8,775	8,916	8,859	8,816	8,971
NaH	6,207	6,234	6,214	6,289	6,294	6,239	6,248	6,207	6,252	6,206	2,314	6,400
O_3	0,663	0,705	0,678	0,526	0,637	0,635	0,668	0,663	0,679	0,669	0,678	0,530
PH_3	0,715	0,798	0,664	1,413	1,443	0,852	0,706	0,715	0,669	0,661	0,641	0,580
PO_4^{-3}	0,879	0,013	2,963	0,911	0,679	0,932	0,651	0,879	0,394	0,881	1,895	
SH_2	1,139	1,318	1,052	1,935	1,945	1,310	1,083	1,139	1,039	1,046	1,011	
SO_2	1,658	1,775	1,643	2,147	2,142	1,676	1,651	1,658	1,645	1,641	1,620	1,630

Tabela 34: Valores de momento dipolo em Debye usando o método HF

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3	aug pc-3	Exp
HCO ₃ ⁻	3,220	3,249	3,172	3,341	3,430	3,078	3,163	3,146	3,154	3,169	3,151	
NO ₂ ⁻	0,566	0,625	0,573	0,610	0,699	0,608	0,570	0,549	0,562	0,553	0,556	
OH ⁻	1,604	1,734	1,559	1,773	2,130	1,389	1,556	1,497	1,518	1,585	1,503	1,660
AlF ₂ H	1,430	1,497	1,428	2,091	2,182	1,661	1,504	1,411	1,441	1,416	1,414	
AlFH ₂	1,382	1,508	1,387	2,055	2,224	1,596	1,441	1,352	1,393	1,377	1,371	
C ₂ H ₄ O ₂	4,727	4,772	4,707	5,263	5,343	4,577	4,698	4,640	4,692	4,695	4,689	
C ₃ H ₆ O ₂	4,601	4,644	4,582	5,146	5,231	4,447	4,572	4,516	4,568	4,570	4,566	
C ₄ H ₈ O ₂	4,555	4,596	4,538	5,127	5,200	4,403	4,525	4,466	4,523	4,525		
C ₅ H ₁₀ O ₂	4,615	4,655	4,598	5,169	5,251	4,447	4,587	4,525	4,583	4,585		
C ₆ H ₅ OCH ₃	1,343	1,372	1,328	1,816	1,793	1,422	1,327	1,330	1,321			
CH ₂ F ₂	2,105	2,133	2,092	2,582	2,672	2,118	2,103	2,055	2,087	2,084	2,081	1,970
CH ₃ F	1,971	2,013	1,947	2,423	2,499	2,006	1,953	1,938	1,940	1,941	1,936	1,850
CHF ₃	1,764	1,779	1,748	2,187	2,236	1,762	1,756	1,720	1,746	1,742	1,739	1,650
CO	0,151	0,173	0,154	0,380	0,408	0,114	0,139	0,126	0,146	0,145	0,144	0,112
H ₂ CO ₃	0,435	0,402	0,447	0,302	0,250	0,315	0,430	0,424	0,450	0,449	0,451	
H ₂ PO ₄ ⁻	4,347	4,426	4,324	4,899	4,817	4,245	4,306	4,316	4,313	4,330	4,307	
H ₂ SO ₄	4,304	4,345	4,277	5,087	4,918	4,345	4,269	4,320	4,274	4,270	4,260	2,725
H ₃ PO ₄	3,315	8,062	3,316	3,315	3,285	3,194	3,303	3,299	3,317	3,313	3,307	
HCl	1,219	1,321	1,196	1,873	1,863	1,407	1,233	1,261	1,191	1,181	1,169	1,080
HF	1,916	1,955	1,894	2,310	2,351	1,913	1,896	1,906	1,890	1,892	1,887	
HPO ₄ ⁻²	3,210	3,324	3,207	3,447	3,468	3,024	3,187	3,138	3,195	3,210	3,192	
HSO ₄ ⁻	3,087	3,125	3,070	3,417	3,350	3,043	3,060	3,084	3,068	3,071	3,058	
LiH	6,133	6,207	6,063	6,019	6,020	5,936	6,026	5,973	6,004	6,004	6,003	5,880
NaCl	9,538	9,643	9,419	10,349	10,238	9,451	9,500	9,358	9,464	9,427	9,367	8,971
NaH	7,041	7,095	7,076	7,175	7,180	7,063	7,120	7,075	7,124	7,068	7,065	6,400
O ₃	0,889	0,873	0,835	0,746	0,838	0,840	0,820	0,854	0,834	0,834	0,834	0,530
PH ₃	0,750	0,803	0,746	1,253	1,283	0,804	0,795	0,748	0,762	0,742	0,742	0,580
SH ₂	1,125	1,291	1,091	1,888	1,900	1,306	1,143	1,161	1,097	1,086	1,070	
SO ₂	1,883	2,067	1,883	2,665	2,645	2,041	1,889	1,928	1,879	1,875	1,853	1,630

Fonte: Do autor (2021)

Tabela 35: Valores de momento dipolo em Debye usando o método MP2

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	Exp
HCO ₃ ⁻	2,987	3,015	2,937	3,089	3,186	2,842	2,934	2,912	2,924	
NO ₂	0,694	0,740	0,684	0,736	0,811	0,733	0,680	0,677	0,674	
OH ⁻	1,573	1,705	1,536	1,699	2,081	1,330	1,532	1,452	1,495	1,660
AlF ₂ H	1,534	1,606	1,532	2,164	2,261	1,731	1,602	1,510	1,542	
AlFH ₂	1,534	1,664	1,538	2,180	2,360	1,720	1,590	1,499	1,543	
C ₂ H ₄ O ₂	4,907	4,951	4,885	5,419	5,506	4,758	4,877	4,817	4,871	
C ₃ H ₆ O ₂	4,764	4,806		5,287	5,378	4,612	4,732	4,674		
C ₄ H ₈ O ₂	4,731	4,771		5,280	5,360	4,580	4,699	4,638		
CH ₂ F ₂	2,229	2,257	2,213	2,691	2,780	2,249	2,224	2,179	2,209	1,970
CH ₃ F	2,101	2,143	2,076	2,536	2,617	2,132	2,082	2,065	2,070	1,850
CHF ₃	1,865	1,878	1,846	2,274	2,321	1,871	1,852	1,822	1,843	1,650
CO	0,321	0,342	0,323	0,545	0,578	0,281	0,307	0,293	0,315	0,112
H ₂ CO ₃	3,423	3,439	3,395	3,634	3,607	3,371	3,388	3,398	3,387	
H ₂ PO ₄ ⁻	4,237	4,298	4,213	4,757	4,685	4,137	4,194	4,203	4,200	
H ₂ SO ₄	4,348	4,392	4,319	5,140	4,973	4,401	4,309	4,362	4,315	2,725
H ₃ PO ₄	3,585	3,604		3,691	3,638	3,481	3,568	3,566	3,581	
HCl	1,223	1,325	1,200	1,875	1,865	1,411	1,237	1,265	1,195	1,080
HF	1,961	1,998	1,938	2,339	2,383	1,958	1,940	1,949	1,934	
HPO ₄ ⁻²	2,965	3,033	2,962	3,153	3,183	2,773	2,939	2,888	2,950	
HSO ₄ ⁻	2,888	2,928	2,871	3,197	3,136	2,835	2,857	2,879	2,868	
LiH	6,110	6,184	6,040	5,997	5,997	5,915	6,004	5,951	5,981	5,880
NaCl	9,514	9,618	9,395	10,327	10,215	9,429	9,476	9,336	9,441	8,971
NaH	7,014	7,068	7,049	7,149	7,153	7,040	7,094	7,049	7,098	6,400
O ₃	0,832	0,815	0,779	0,664	0,739	0,772	0,759	0,805	0,778	0,530
PH ₃	0,707	0,750	0,701	1,207	1,242	0,765	0,755	0,706	0,719	0,580
SH ₂	1,116	1,271	1,081	1,875	1,885	1,299	1,137	1,154	1,089	
SO ₂	2,074	2,262	2,073	2,730	2,712	2,235	2,065	2,117	2,065	1,630

Fonte: Do autor (2021)

Figura 47: Diferença entre as medidas de momento dipolo calculadas

Fonte: Do autor (2021)

4.3.4 Polarizabilidade

A propriedade analisada na seção anterior, momento dipolo, pode ser interpretada como o quanto que a nuvem eletrônica se desloca, polarizando a molécula mesmo que essa não tenha carga, essa propriedade depende dos átomos envolvidos na ligação e da geometria molecular. Entretanto, essa medida não considera a ação campo elétrico externo, apenas a eletronegatividade dos átomos que integram a moléculas.⁶⁴

No entanto, um campo elétrico externo pode ser aplicado à molécula e a tendência da nuvem eletrônica se distorcer na presença desse campo elétrico externo é a polarizabilidade.⁶⁵

$$p_e(E) = p_e(E = 0) + \alpha E + \frac{1}{2} E \beta E + \dots \quad (4.5)$$

A equação 4.5 calcula o momento dipolo na presença de um campo elétrico externo, $p_e(E)$ e depende do momento dipolo sem a presença do campo elétrico, $p_e(E = 0)$ e os tensores α e β que representam respectivamente polarizabilidade e hiperpolarizabilidade.^{64, 65}

Para além, a nuvem eletrônica pode ser deslocada de forma isotrópica ou anisotrópica dependendo da geometria da moléculas, calculadas pelas equações abaixo e os valores α_{XX} , α_{XY} , α_{YY} , α_{XZ} , α_{YZ} e α_{ZZ} estarão relatados no Anexo C.⁶⁵

$$\alpha_{isotropica} = \frac{1}{3}(\alpha_{XX} + \alpha_{YY} + \alpha_{ZZ})$$

$$\alpha_{anisotropica} = \frac{\sqrt{2}}{2}[(\alpha_{XX} - \alpha_{YY})^2 + (\alpha_{YY} - \alpha_{ZZ})^2 + (\alpha_{ZZ} - \alpha_{XX})^2]^{\frac{1}{2}}$$

Existem duas medidas de polarizabilidade, a estática e a dependente da frequência, a primeira, avalia a polarizabilidade em um campo elétrico constante, enquanto a segunda estuda o comportamento da polarizabilidade nos casos onde o campo elétrico externo oscila com uma determinada frequência.⁶⁴ Neste trabalho, será avaliado a propriedade de polarizabilidade estática.

Considerando que a polarizabilidade é uma propriedade sensível à geometria molecular e aos elétrons de valência espera-se que essa propriedade seja melhor descrita por conjuntos de base que contenham funções mais difusas e mais funções de polarização.^{64, 66} Por isso, imagina-se que os conjuntos de base aMCG-3d2f1g, aug-cc-pVTZ e aug-pc-3 apresentem resultados mais próximos aos experimentais.

As tabelas 38, 39, 40, 41, 42 e 43 mostram os valores de polarizabilidade para os métodos B3LYP-sp, B3LYP-opt, BLP, BHHLYP, PBE0 e HF, respectivamente.

Ao comparar os resultados obtidos pelos funcionais B3LYP-sp (38) e o B3LYP-opt (39), percebe-se que para os conjuntos de base MCG, cc-pVTZ, aug-cc-pVTZ, pc-3 e aug-pc-3 não houveram diferenças drásticas entre o o valor de polarizabilidade obtida ao realizar um cálculo tipo *single point* usando a geometria calculada pelo conjunto de base aMCG-2d1f e otimizando a geometria com o próprio conjunto de base. Isso induz que as geometria calculadas pelo conjuntos de base aMCG-2d1f estão de acordo com as obtidas com esses conjuntos amplamente utilizados na literatura.

Entretanto, apesar de não haver resultados experimentais para realizar uma comparação direta e ter havido uma grande variação de entre os resultados, pode-se destacar os resultados obtidos pelos cálculos B3LYP-sp (aMCG 2d1f= 200, 16 e aMCG 3d2f1g = 200, 85) e B3LYP-opt (aMCG 2d1f= 1120, 5, aMCG 3d2f1g = 496, 76) para a molécula PO_4^{-3} .

Partindo do pressuposto que a geometria calculada pelo conjunto aMCG-2d1f para cálculos tipo B3LYP-sp está correta, visto que houveram casos em que ambos os resultados foram semelhantes, como com os conjuntos de base aug-cc-pVDZ e aug-cc-pVTZ, deve-se investigar se a geometria obtida pela otimização (B3LYP-opt) é muito discrepante, e como é possível observar na tabela 4.3.4, a única diferença entre as geometrias é o valor médio de ângulo de ligação obtido pelo conjunto de base aMCG-3d2f1g.

De mesmo modo, o fenômeno citado ocorreu para a molécula CO_3^{-2} . Entretanto ao comparar as geometrias, tabela 4.3.4, percebe-se que em média os valores de comprimento

Tabela 36: Valores médios de comprimento e ângulo de ligação para a molécula PO_4^{-3}

	<i>Single Point</i>	Otimização (integral=ultrafine)	
	aMCG-2d1f = aMCG-3d2f1g	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g
P-O	1,556	1,556	1,557
O-P-O	109,47	109,47	109,35

Fonte: Do autor (2021)

de ligação são iguais. Portanto, não há uma fonte clara para esse erro entre os valores apresentados pelo funcional B3LYP-sp e o B3LYP-opt.

Tabela 37: Valores médios de comprimento e ângulo de ligação para a molécula CO_3^{-2}

	<i>Single Point</i>	Otimização (integral=ultrafine)	
	aMCG-2d1f = aMCG-3d2f1g	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g
C-O	1,291	1,291	1,291
O-C-O	120,00	120,00	120,00

Fonte: Do autor(2021)

Apesar disso, ao comparar os resultados obtidos computacionalmente com os experimentais, observa-se que o funcional BLYP foi o único que favoreceu o desempenho com conjuntos de base menores ou com menor quantidade de funções difusas como 6-311G+, cc-pVTZ e MCG, em ordem crescente de acurácia, enquanto superestima os valores calculados com conjuntos de base maiores e mais difusos. Já os outros funcionais, os conjuntos de base que apresentaram o melhor desempenho foram aqueles mais difusos e polarizados, como o esperado, destacando os conjuntos aMCG-3d2f1g e aug-pc-3, em ordem crescente de acurácia.

Os resultados obtidos pelo cálculo tipo HF apresentaram os menores valores de polarizabilidade, porém esse resultado é esperado uma vez que essa metodologia não contempla a descrição da correlação entre os elétrons. Já o método MP2, apesar de se comportar de forma semelhante aos funcionais B3LYP, BHHLYP e PBE0, apresentou resultados ligeiramente menores para todos os conjuntos de base, indicando que para um resultado ainda mais preciso, seria necessário um conjunto de base maior e/ou menos contraído.

Comparando diretamente os conjuntos de base derivado do pMCG-HF, MCG e aMCG, observa-se a mudança da metodologia de seleção dos expoentes, átomos neutros

(MCG) *vs* átomos aniônicos (aMCG), resultou de fato em uma melhora na descrição da polarizabilidade, uma vez que o conjunto aMCG-3d2f1g apresentou um dos melhores desempenhos, equiparável aos conjuntos aug-pc-3, aug-cc-pVTZ e ao resultado experimental.

Tabela 38: Valores de polarizabilidade isotrópica em Bohr³ calculados com o funcional B3LYP-sp

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3	aug pc-3	Exp
BF ₄ ⁻	20,67	23,66	24,39	12,91	18,96	13,99	24,09	18,28	24,67	23,66	25,05	
BH ₄ ⁻	33,27	38,43	38,98	26,02	30,03	24,51	40,31	29,78	41,97	37,54	42,47	
CO ₃ ⁻²	32,54	147,65	150,61	18,28	43,14	17,60	52,72	24,09	62,07	45,37	439,67	
HCO ₃ ⁻	29,22	33,94	35,72	20,18	29,55	19,53	34,40	24,45	35,59	33,57	36,78	
NO ₂ ⁻	22,04	31,98	33,52	13,15	24,84	12,74	29,86	16,42	32,00	26,50	36,80	
NO ₃ ⁻	26,64	31,44	33,16	18,15	27,32	17,31	31,40	21,52	32,73	30,53	34,19	
OH ⁻	12,61	28,75	32,26	6,03	11,40	5,61	22,69	8,46	26,62	18,77	42,03	
AlF ₂ H	23,42	22,26	24,06	17,97	20,61	19,29	23,99	21,89	24,63	23,84	24,77	
AlF ₃	19,63	18,76	20,56	13,98	16,71	15,41	20,23	17,95	21,06	20,32	21,26	
AlFH ₂	27,11	25,14	27,43	21,95	23,59	22,69	27,98	25,54	28,32	27,27	28,40	
AlH ₃	31,48	28,66	31,48	26,27	27,27	26,46	32,95	29,79	32,88	31,42	32,86	
BF ₃	14,59	15,65	16,09	10,68	12,90	11,30	15,84	13,68	16,20	15,91	16,30	16,33
BH ₃	16,44	17,11	17,32	14,47	14,67	14,74	17,68	16,39	17,66	17,25	17,65	
C ₂ H ₄ O ₂	32,88	33,41	34,52	27,05	30,90	26,93	34,44	30,77	34,66	34,26	34,73	34,75
C ₃ H ₆ O ₂	44,74	45,21	46,33	37,70	41,93	37,70	46,30	42,41	46,48	46,14	46,49	46,97
C ₄ H ₆	54,51	54,96	56,81	46,52	52,11	46,61	57,18	51,46	57,36	56,67	57,40	
C ₄ H ₈ O ₂	57,09	57,58	58,73	48,80	53,47	48,91	58,73	54,46	58,88	58,57	0,00	
C ₃ H ₁₀ O ₂	69,56	70,07	71,30	60,03	65,10	60,24	71,30	66,64	71,46	71,15	0,00	
C ₆ H ₅ OCH ₃	84,95	85,56	87,42	73,19	80,95	73,81	87,62	80,83	87,74	87,28	0,00	
C ₆ H ₆	66,37	66,82	68,81	56,80	63,57	57,25	69,12	62,78	69,32	68,72	0,00	67,21
CF ₄	17,09	18,59	19,49	12,25	15,79	12,42	18,92	15,65	19,52	19,13	19,71	19,06
CH ₂ F ₂	16,16	16,79	17,89	12,26	14,34	12,72	17,66	15,13	18,05	17,64	18,18	18,63
CH ₃ F	15,74	15,92	17,09	12,44	13,69	12,88	17,04	15,03	17,31	16,91	17,39	17,14
CH ₄	15,84	15,34	16,78	12,87	13,40	13,12	16,93	15,26	17,02	16,69	17,03	16,52
CHF ₃	16,76	17,88	18,85	12,29	15,26	12,63	18,44	15,44	18,93	18,54	19,09	18,90
CO	12,02	12,32	13,02	9,96	11,58	9,61	12,93	11,37	13,19	12,92	13,23	13,18
CO ₂	15,40	15,76	17,02	12,24	14,18	12,09	16,69	14,43	17,16	16,78	17,32	16,92
F ₂	6,10	7,30	8,29	3,99	5,50	4,15	7,62	5,47	8,25	7,76	8,64	7,83
H ₂	4,18	3,70	5,19	2,30	2,30	2,95	5,35	4,03	5,55	5,12	5,55	
H ₂ CO ₃	24,65	25,34	26,53	19,09	23,17	18,85	26,25	22,42	26,65	26,20	26,79	
H ₂ PO ₄ ⁻	41,64	44,44	46,46	40,83	40,83	28,98	46,21	35,12	46,78	44,49	47,20	
H ₂ SO ₄	34,32	35,06	36,26	33,98	33,98	26,38	36,23	31,05	36,42	35,69	36,41	

Continuação da tabela													
H ₃ PO ₄	37,39	37,72	38,95	36,03	36,03	28,76	39,00	33,61	39,15	38,29	39,14		
HCl	14,69	12,66	16,29	8,60	8,60	8,67	16,36	11,98	17,55	14,91	18,06	16,97	
HF	4,10	4,49	5,51	3,04	3,04	2,53	5,15	3,64	5,59	5,22	5,90	5,40	
HPO ₄ ⁻²	47,85	392,98	389,71	53,35	53,35	29,01	63,52	36,92	67,26	55,83	79,16		
HSO ₄ ⁻	37,52	41,11	42,73	29,38	29,38	25,99	42,19	31,96	42,85	40,85	43,30		
LiH	14,89	15,14	19,10	26,72	26,93	28,48	29,88	28,66	29,78	27,88	29,76		
NaCl	25,39	27,13	30,07	23,37	24,72	26,45	32,13	29,67	33,63	29,12	34,11		
NaH	24,32	35,33	36,51	40,89	41,41	42,97	45,31	43,37	44,63	42,12	43,97		
O ₂	8,51	9,23	10,33	5,59	7,40	5,70	9,70	7,16	10,30	9,65	10,67	10,54	
O ₃	16,80	17,80	18,73	12,13	15,67	12,00	18,12	14,30	18,70	17,97	18,99	20,78	
PH ₃	29,15	25,76	29,62	22,76	23,43	22,98	30,46	26,56	31,09	29,36	31,18	28,59	
PO ₄ ⁻³	53,11	200,16	200,85	30,78	86,64	26,92	102,37	36,93	130,08	71,61			
SH ₂	21,21	19,03	22,76	14,16	16,46	14,89	23,77	18,75	24,98	22,52	25,41		
SiH ₄	31,23	27,87	31,18	25,46	26,09	26,54	32,19	29,71	32,15	30,98	32,06		
SiO ₂	28,98	27,03	29,44	23,26	26,31	22,93	29,33	26,23	30,22	28,86	30,40		
SO ₂	23,58	24,05	25,25	19,02	22,40	17,71	25,10	21,14	25,56	24,42	25,70	26,20	
SO ₄ ⁻²	40,74	57,00	57,62	27,66	47,54	24,21	53,59	31,71	56,76	48,55	64,34		

Fonte: Do autor (2021)

Tabela 39: Valores de polarizabilidade isotrópica em Bohr³ calculados com o funcional B3LYP-opt

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3	Exp
BF ₄ ⁻	20,67	22,92	24,39	13,27	19,51	14,08	24,35	18,26	24,69	23,64	
BH ₄ ⁻	33,2	35,73	38,9	26	30,05	24,92	40,71	29,69	41,9	37,45	
CO ₃ ⁻²	32,91	139,45	161,35	19,36	44,08	18,06	53,04	24,42	62,05	45,68	
HCO ₃ ⁻	29,21	33,94	35,71	20,97	30,57	19,65	34,61	24,44	35,65	33,54	
NO ₂ ⁻	22,04	31,98	33,54	13,91	24,89	12,9	29,81	16,46	32,02	26,47	
NO ₃ ⁻	26,58	31,44	33,13	19,2	28,66	17,37	31,52	21,46	32,7	30,44	
OH ⁻	12,61	28,74	32,22	6,19	11,53	5,75	22,72	8,49	26,62	18,75	
AlF ₂ H	23,38	22,26	24,01	18,62	21,44	19,75	24,38	21,99	24,73	23,77	
AlF ₃	19,63	18,76	20,53	15,05	18,04	16,08	20,73	18,13	21,25	20,29	
AlFH ₂	27,03	25,15	27,36	22,35	24,08	23,05	28,28	25,6	28,36	27,17	
AlH ₃	31,34	28,67	31,35	26,46	27,46	26,68	33,17	29,77	32,82	31,25	
BF ₃	14,59	14,95	16,1	11,01	13,32	11,41	16,08	13,7	16,24	15,91	16,33
BH ₃	16,4	16	17,29	14,47	14,67	15,07	17,95	16,37	17,63	17,19	
C ₂ H ₄ O ₂	32,86	33,41	34,49	27,57	31,53	27,26	34,8	30,76	34,67	34,21	34,75
C ₃ H ₆ O ₂	44,72	45,21	46,28	38,29	42,67	38,2	46,81	42,4	46,48	46,07	46,97
C ₄ H ₆	54,49	54,95	56,74	46,86	52,62	47,44	58,15	51,44	57,35	56,6	
C ₄ H ₈ O ₂	57,06	57,58	58,68	49,48	54,3	49,58	59,38	54,44	58,88	58,49	
C ₃ H ₁₀ O ₂	69,53	70,07	71,23	60,8	66,05	61,09	72,1	66,62	71,46	71,05	
C ₆ H ₅ OCH ₃	84,95	85,57	87,35	74,21	82,22	74,94	88,88	80,83	87,77	87,22	
C ₆ H ₆	66,38	66,82	68,75	57,23	64,18	58,23	70,24	62,79	69,34	68,68	67,21
CF ₄	17,09	18,59	19,49	13,25	16,97	12,48	19,11	15,65	19,53	19,11	19,06
CH ₂ F ₂	16,15	16,79	17,88	12,61	14,86	12,91	17,86	15,12	18,05	17,63	18,63
CH ₃ F	15,73	15,92	17,07	12,58	13,96	13,15	17,25	15,03	17,3	16,89	17,14
CH ₄	15,82	15,34	16,75	12,87	13,42	13,42	17,19	15,27	17,03	16,66	16,52
CHF ₃	16,76	17,88	18,85	12,91	16,03	12,73	18,62	15,42	18,93	18,52	18,9
CO	12,02	12,32	13,01	10,09	11,72	9,66	13,01	11,37	13,19	12,9	13,18
CO ₂	15,38	15,76	17,02	12,67	14,66	12,22	16,86	14,43	17,17	16,75	16,92
F ₂	6,08	7,3	8,28	4,37	5,96	4,21	7,65	5,46	8,24	7,74	7,83
H ₂	4,17	3,7	5,18	2,29	2,29	3,04	5,49	4,03	5,55		
H ₂ CO ₃	24,63		26,52	19,75	24,01	19,02	26,45	22,43	26,67	26,15	
H ₂ PO ₄ ⁻	41,71	44,45	46,46	36,1	47,43	30,23	48,14	35,39	47,28	44,35	
H ₂ SO ₄	34,49	35,06	36,42			28,28				35,6	

Continuação da tabela												
H ₃ PO ₄	36,85	37,72	38,97	33,86	40,18	29,36	40,13	33,27	39,02	37,71		
HCl	14,68	12,66	16,29	33,86	40,18	29,36	40,13	33,27	39,02	14,88	16,97	
HF	4,1	4,49	5,51	2,27	3,12	2,54	5,16	3,64	5,59	5,22	5,4	
HPO ₄ ⁻²	48,12	382,26	0	37,02	60,24	30,36	65,72	37,39	67,82	55,86		
HSO ₄ ⁻	37,69	41,13	42,93	38,42	50,53	27,79	45,04	32,53	43,72	40,78		
LiH	14,91	15,14	19,16	26,93	27,13	28,89	30,28	28,79	29,92	28		
NaCl	25,36	27,13	30,05	23,82	25,17	26,45	32,23	29,72	33,69	29,09		
NaH	24,28	35,32	36,49	41,06	41,58	43,03	45,22	43,44	44,66			
O ₂	8,48	9,23	10,32							9,62	10,54	
O ₃	16,74	17,8	18,71	13,04	16,7	12,04	18,11	14,29	18,67	17,89	20,78	
PH ₃	29,17	25,76	29,62	23,54	24,28	23,44	30,89	26,65	31,17	29,34	28,59	
PO ₄ ⁻³	53,24	1120,5	496,76	34,82	91,23	28,2	103,49	37,23	129,82	71,59		
SH ₂	21,22	19,03	22,77	14,76	17,13	15,13	24,02	18,79	25,03	22,51		
SiH ₄	31,11	27,87	31,05	25,84	26,48	26,94	32,62	29,68	32,12	30,81		
SiO ₂	28,71	27,03	29,16	24,82	28,34	23,44	30,12	26,17	30,16	28,49		
SO ₂	23,63	24,06	25,29	21,6	25,92	18,47	26,21	21,38	25,89	24,34	26,2	
SO ₄ ⁻²		57,46	57,76	35,54	60	25,78	56,67	32,14	57,72	48,48		

Fonte: Do autor (2021)

Tabela 40: Valores de polarizabilidade isotrópica em Bohr³ calculados com o funcional BLYP

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3	aug pc-3	Exp
BF ₄ ⁻	22,38	26,27	27,04	13,97	21,24	14,93	26,72	19,5	26,72	25,87	27,89	
BH ₄ ⁻	35,18	42,56	43,06	26,79	32,11	24,93	44,09	30,7	44,09	40,36	47,41	
CO ₃ ⁻²												
HCO ₃ ⁻	31,68	38,98	40,8	21,7	32,94	20,84	38,62	26,09	38,62	37,12	42,21	
NO ₂ ⁻	23,28	38,8	40,45	13,53	27,68	13,06	33,59	16,94	33,59	28,73	46,79	
NO ₃ ⁻	28,28	35,23	37,02	18,84	29,68	17,95	34,36	22,42	34,36	32,96	38,35	
OH ⁻	13,82	66,02	67,67	6,57	12,49	5,91	27,96	8,98	27,96	21,42	63,53	
AlF ₂ H	25,22	24,2	25,96	19,74	22,63	20,85	25,98	23,52	25,98	25,67	26,79	
AlF ₃	21,65	20,91	22,7	15,99	19,07	17,2	22,48	19,8	22,48	22,36	23,53	
AlFH ₂	28,62	26,83	29,06	23,39	25,21	23,94	29,68	26,88	29,68	28,83	30,13	
AlH ₃	32,72	30,1	32,84	27,28	28,46	27,35	34,39	30,81	34,39	32,72	34,33	
BF ₃	15,66	16,9	17,37	11,54	14,16	12,06	17,14	14,58	17,14	17,13	17,62	16,33
BH ₃	16,98	17,74	17,93	14,92	15,21	15	18,3	16,84	18,3	17,83	18,31	
C ₂ H ₄ O ₂	34,87	35,68	36,83	28,55	33,09	28,25	36,76	32,36	36,76	36,5	37,08	34,75
C ₃ H ₆ O ₂	47,29	48,07	49,21	39,64	44,65	39,46	49,19	44,51	49,19	48,96	49,41	46,97
C ₄ H ₆	56,41	57,14	59,03	47,92	54,17	47,95	59,44	53,01	59,44	58,83	59,69	
C ₄ H ₈ O ₂	60,27	61,11	62,28	51,25	56,8	51,13	62,27	57,11	62,27	62,05	0	
C ₅ H ₁₀ O ₂	73,38	74,27	75,53	62,98	69,04	62,95	75,53	69,85	75,53	75,31		
C ₆ H ₅ OCH ₃	88,62	89,63	91,51	76,32	84,99	76,73	91,74	84,01	91,74			
C ₆ H ₆	68,52	69,28	71,25	58,48	66	58,87	71,51	64,56	71,52	71,11	71,81	67,21
CF ₄	18,38	20,17	21,11	13,19	17,36	13,21	20,47	16,63	20,47	20,63	21,37	19,06
CH ₂ F ₂	17,12	17,94	19,11	12,98	15,43	13,35	18,87	15,88	18,87	18,78	19,47	18,63
CH ₃ F	16,45	16,74	17,99	12,97	14,4	13,34	17,94	15,61	17,94	17,77	18,37	17,14
CH ₄	16,42	15,93	17,45	13,24	13,87	13,41	17,61	15,72	17,61	17,35	17,76	16,52
CHF ₃	17,93	19,3	20,33	13,15	16,65	13,36	19,87	16,33	19,87	19,91	20,62	18,90
CO	12,44	12,86	13,58	10,17	12,14	9,76	13,49	11,65	13,49	13,45	13,82	13,18
CO ₂	16,09	16,56	17,89	12,67	14,91	12,49	17,52	14,98	17,52	17,61	18,24	16,92
F ₂	6,27	7,66	8,74	4,01	5,76	4,19	7,98	5,56	7,98	8,08	9,2	7,83
H ₂	4,25	3,77	5,32	2,34	2,34	2,98	5,5	4,09	5,5	5,24	5,74	
H ₂ CO ₃	25,78	25,34	27,98	19,86	24,55	19,55	27,69	23,24	27,69	27,57	28,29	
H ₂ PO ₄ ⁻	45,55	50,24	52,28	34,59	45,89	31,46	51,69	37,96	51,69	49,25	53,19	
H ₂ SO ₄	37,23	38,4	39,62	31,88	37,44	28,5	39,61	33,46	39,61	38,91	39,8	
H ₃ PO ₄	39,77	41,34	41,83	32,25	38,51	30,21	41,92	35,38	41,92	41,09	42,08	

Continuação da tabela													
HCl	15,05	13,11	16,82	7,07	9,09	8,81	16,88	12,17	16,88	15,31	18,84	16,97	
HF	4,33	4,81	5,91	2,33	3,29	2,64	5,55	3,79	5,55	5,57	6,42	5,40	
HPO ₄ ⁻²													
HSO ₄ ⁻	40,87	46,28	47,84	32,08	43,3	28,06	47,01	34,47	47,01	45,1	48,59		
LiH	16,56	17,18	21,23	30,94	31,3	32,92	34,07	32,52	34,07	31,58	33,74		
NaCl	28,57	31,45	34,12	28,53	30,1	31,7	37,09	34,33	37,09	33,52	38,88		
NaH	26	39,22	40,2	46,14	46,98	48,65	50,79	48,18	50,79	47,15			
O ₂												10,54	
O ₃	17,42	18,7	19,71	12,36	16,44	12,2	19,06	14,62	19,06	18,76	20,05	20,78	
PH ₃	29,94	26,62	30,54	23,45	24,26	23,4	31,42	27,16	31,42	30,26	32,28	28,59	
PO ₄ ⁻³													
SH ₂	21,7	19,75	23,54	14,57	17,26	15,13	24,55	19,1	24,55	23,19	26,48		
SiH ₄	32,41	28,99	32,36	26,24	26,99	27,15	33,39	30,58	33,39	32,14	33,37		
SiO ₂	31,04	29,11	31,6	24,58	28,15	24,29	31,62	27,93	31,62	30,95	32,76		
SO ₂	24,77	25,46	26,75	19,6	23,66	18,3	26,63	22	26,63	25,77	27,34	26,20	
SO ₄ ⁻²	44,06	71,4	71,29	29,89	54,74	25,78	61,69	33,82	61,69	53,98	85,92		

Fonte: Do autor (2021)

Tabela 41: Valores de polarizabilidade isotrópica em Bohr³ calculados com o funcional BHHLYP

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2flg	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3	aug pc-3	Exp
BF ₄ ⁻	18,86	20,42	21,79	11,76	16,67	12,98	21,49	16,95	22,01	21,36	22,29	
BH ₄ ⁻	31,19	32,31	35,42	25,02	27,94	23,9	36,76	28,59	37,9	34,68	38,21	
CO ₃ ⁻²	30,05	53,18	55,91	17,43	35,99	16,93	43,46	22,96	48,4	39,63	65,92	
HCO ₃ ⁻	26,91	29,98	31,64	18,83	26,76	18,21	30,82	22,84	31,76	30,25	32,42	
NO ₂ ⁻	20,64	26,75	28,2	12,76	22,03	12,41	26,24	15,84	27,68	24,19	29,91	
NO ₃ ⁻	24,84	28,11	29,73	17,38	24,99	16,6	28,5	20,49	29,57	28,03	30,5	
OH ⁻	11,37	18,9	22,28	5,52	10,13	5,3	18,41	7,93	21,14	16,16	28,66	
AlF ₂ H	0	20,26	22,04	16,05	18,44	17,59	21,89	20,12	22,5	21,87	22,64	
AlF ₃	17,51	16,58	18,33	11,89	14,24	13,54	17,93	16,03	18,73	18,18	18,92	
AlFH ₂	25,42	23,33	25,66	20,3	21,77	21,25	26,13	24,02	26,46	25,54	26,53	
AlH ₃	29,98	27,03	29,91	25,01	25,86	25,31	31,29	28,48	31,21	29,89	31,18	
BF ₃	13,41	13,66	14,72	9,71	11,54	10,46	14,46	12,67	14,8	14,58	14,88	16,33
BH ₃	15,81	15,33	16,63	13,92	14,05	14,37	16,96	15,83	16,92	16,57	16,91	
C ₂ H ₄ O ₂	31,14	31,14	32,19	25,53	28,76	25,56	32,13	29,08	32,32	32	32,37	34,75
C ₃ H ₆ O ₂	42,34	42,34	43,41	35,71	39,25	35,89	43,38	40,19	43,54	43,27	43,55	46,97
C ₄ H ₆	92,62	92,6	94,06	77,21	90,16	75,22	94,4	82,29	94,8	92,98	95,1	
C ₄ H ₈ O ₂	54,03	54,04	55,14	46,31	50,19	46,6	55,13	51,65	55,27	55,02		
C ₅ H ₁₀ O ₂	65,83	65,83	67,01	57,02	61,23	57,43	67,02	63,23	67,15	66,91	0	
C ₆ H ₅ OCH ₃	81,63	81,62	83,46	70,02	77,1	70,81	83,63	77,55	83,76	83,38		
C ₆ H ₆	64,51	64,51	66,52	55,07	61,34	55,55	66,78	60,93	67	66,46	0	67,21
CF ₄	15,78	17,02	17,85	11,28	14,24	11,61	17,37	14,62	17,89	17,59	18,03	19,06
CH ₂ F ₂	15,14	15,62	16,62	11,5	13,25	12,05	16,41	14,31	16,75	16,44	16,85	18,63
CH ₃ F	14,95	15,06	16,12	11,87	12,96	12,38	16,06	14,37	16,29	15,98	16,35	17,14
CH ₄	15,23	14,73	16,07	12,49	12,93	12,81	16,21	14,77	16,28	15,99	16,28	16,52
CHF ₃	15,54	16,43	17,33	11,38	13,84	11,85	16,96	14,47	17,4	17,09	17,52	18,90
CO	11,55	11,76	12,42	9,68	10,99	9,39	12,35	11,01	12,58	12,35	12,6	13,18
CO ₂	14,9	14,9	16,07	11,72	13,38	11,61	15,78	13,77	16,19	15,86	16,31	16,92
F ₂	6,98	6,98	7,85	4,02	5,32	4,17	7,29	5,41	7,84	7,45	8,11	7,83
H ₂	3,6	3,6	5,03	2,24	2,24	2,9	5,17	3,94	5,34	4,97	5,32	
H ₂ CO ₃	22,87	23,32	24,44	17,72	21,16	17,63	24,19	20,99	24,54	24,18	24,66	
H ₂ PO ₄ ⁻	39,34	39,14	41,08	28,09	35,79	26,51	40,94	32,22	41,41	39,8	41,67	
H ₂ SO ₄	31,84	31,81	32,96	26,54	30,49	24,28	32,92	28,61	33,09	32,52	33,09	
H ₃ PO ₄	33,68	34,13	34,94	26,69	31,22	25,85	34,95	30,44	35,11	34,5	35,13	

Continuação da tabela													
HCl	14,32	12,24	15,74	6,66	8,17	8,54	15,81	11,77	16,88	14,49	17,29	16,97	
HF	3,85	4,17	5,07	2,1	2,78	2,43	4,73	3,47	5,13	4,84	5,36	5,40	
HPO ₄ ⁻²	53,64	53,54	56,14	28,88	44,84	26,64	52,88	33,96	54,97	48,67	58,34		
HSO ₄ ⁻	34,14	36,4	37,96	26,57	34,11	23,93	37,58	29,42	38,11	36,71	38,43		
LiH	13,01	12,93	17,1	22,81	22,95	24,53	26,17	25,16	26,21	24,49	26,2		
NaCl	22,76	23,5	26,68	18,93	20,11	22,18	28,02	25,85	29,53	25,56	30,12		
NaH	21,84	30,59	32,05	34,72	35,06	36,63	39,22	37,83	39,01	36,43	38,51		
O ₂	8,25	8,84	9,81	5,56	7,12	5,67	9,28	7,06	9,81	9,28	10,07	10,54	
O ₃	16,48	17,25	18,09	12,23	15,31	12,09	17,53	14,25	18,06	17,5	18,29	20,78	
PH ₃	28,26	24,91	28,93	21,99	22,61	22,46	29,45	25,84	30	28,4	30,05	28,59	
PO ₄ ⁻³	47,86	108,23	112,53	27,81	65,67	25,05	78,08	34,22	90,64	61,3	778,38		
SH ₂	20,67	18,34	21,98	13,75	15,72	14,62	22,95	18,34	24,03	21,82	24,36		
SiH ₄	29,86	26,55	29,81	24,58	25,13	25,71	30,81	28,59	30,7	29,64	30,59		
SiO ₂	26,29	24,6	26,88	21,55	24,11	21,18	26,69	24,1	27,52	26,36	27,65		
SO ₂	22,59	22,59	23,68	18,43	21,24	17,04	23,55	20,17	23,93	22,98	24,02	26,20	
SO ₄ ⁻²	37,17	46,86	47,15	25,25	40,69	22,55	46,05	29,45	48,05	43,03	51,24		

Fonte: Do autor (2021)

Tabela 42: Valores de polarizabilidade isotrópica em Bohr³ calculados com o funcional PBE0

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2flg	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3	aug pc-3	Exp
BF ₄ ⁻	20,27	22,33	23,77	12,72	18,42	13,82	23,46	18,07	24,04	23,12	24,37	
BH ₄ ⁻	33,14	35,08	38,49	26,19	29,82	24,95	39,94	30,03	41,32	37,29	41,77	
CO ₃ ⁻²	32,37	109,08	155,73	18,47	41,36	17,76	50,36	24,24	58,52	44,22	282,92	
HCO ₃ ⁻	28,48	32,65	34,41	19,79	28,52	19,18	33,23	24,04	34,4	32,54	35,38	
NO ₂ ⁻	21,65	30,73	32,29	13,08	24,04	12,68	28,9	16,31	30,99	25,88	35,26	
NO ₃ ⁻	25,99	30,29	31,99	17,94	26,44	17,12	30,38	21,22	31,66	29,66	32,9	
OH ⁻	12,32	25,94	29,65	5,81	11,12	5,48	21,49	8,32	25,32	18,23	38,75	
AlF ₂ H	23,2	21,98	23,84	17,72	20,31	19,15	23,73	21,76	24,36	23,63	24,5	
AlF ₃	19,18	18,27	20,1	13,55	16,17	15,1	19,77	17,61	20,57	19,88	20,75	
AlFH ₂	27,16	25,08	27,48	21,95	23,53	22,79	27,94	25,67	28,32	27,34	28,4	
AlH ₃	31,78	28,78	31,76	26,55	27,44	26,83	33,11	30,2	33,07	31,74	33,09	
BF ₃	14,34	14,68	15,8	10,53	12,6	11,18	15,54	13,52	15,89	15,63	15,98	16,33
BH ₃	16,53	16,02	17,38	14,48	14,66	14,93	17,65	16,49	17,71	17,32	17,69	
C ₂ H ₄ O ₂	32,36	32,81	33,9	26,68	30,26	26,64	33,81	30,4	34,04	33,68	34,1	34,75
C ₃ H ₆ O ₂	44,1	44,48	45,59	37,19	41,14	37,32	45,51	41,94	45,72	45,43	45,74	46,97
C ₄ H ₆	53,91	54,19	56,04	46,12	51,24	46,33	56,31	51,13	56,53	55,93	56,58	
C ₄ H ₈ O ₂	56,33	56,73	57,87	48,17	52,53	48,44	57,79	53,88	58	57,73	0	
C ₅ H ₁₀ O ₂	68,67	69,08	70,3	59,25	63,99	59,68	70,21	65,95	70,44	70,17	0	
C ₆ H ₅ OCH ₃	83,78	84,18	86,08	72,2	79,4	73,03	86,17	80,02	86,35	85,98	0	
C ₆ H ₆	65,63	65,86	67,91	56,33	62,53	56,91	68,13	62,39	68,34	67,84	68,36	67,21
CF ₄	16,71	18,15	19,03	12,01	15,32	12,24	18,5	15,41	19,05	18,7	19,23	19,06
CH ₂ F ₂	15,94	16,53	17,6	12,08	14,02	12,6	17,35	15	17,75	17,38	17,86	18,63
CH ₃ F	15,6	15,76	16,9	12,29	13,48	12,81	16,8	14,94	17,1	16,74	17,17	17,14
CH ₄	15,75	15,23	16,66	12,75	13,26	13,08	16,75	15,19	16,88	16,58	16,89	16,52
CHF ₃	16,45	17,51	18,46	12,08	14,84	12,47	18,05	15,25	18,53	18,17	18,67	18,90
CO	11,9	12,17	12,87	9,97	11,41	9,65	12,81	11,33	13,02	12,78	13,06	13,18
CO ₂	15,17	15,52	16,75	12,17	13,91	12,04	16,47	14,3	16,88	16,53	17,01	16,92
F ₂	5,94	7,09	8,05	3,9	5,29	4,08	7,42	5,36	8,02	7,57	8,37	7,83
H ₂	4,21	3,72	5,19	2,29	2,29	2,96	5,34	4,06	5,53	5,14	5,53	
H ₂ CO ₃	24,12	24,74	25,91	18,77	22,54	18,54	25,65	22,08	26,01	25,61	26,14	
H ₂ PO ₄ ⁻	40,66	42,97	45	30,62	39,42	28,4	44,72	34,53	45,34	43,25	45,65	
H ₂ SO ₄	33,42	34,05	35,22	28,49	32,83	25,8	35,19	30,4	35,37	34,72	35,36	
H ₃ PO ₄	36,02	36,77	37,5	28,92	33,92	27,57	37,52	32,46	37,69	36,98	37,7	

Continuação da tabela													
HCl	14,6	12,42	16,09	6,7	8,28	8,61	16,18	11,94	17,24	14,77	17,67	16,97	
HF	4,03	4,4	5,38	2,17	2,93	2,5	5,02	3,6	5,46	5,12	5,74	5,40	
HPO ₄ ⁻²													
HSO ₄ ⁻	36,52	39,67	41,26	28,64	37,19	25,45	40,74	31,33	41,39	39,59	41,78		
LiH	14,79	15,03	18,89	25,98	26,17	27,82	29,37	28,11	29,25	27,34	29,24		
NaCl	24,17	25,2	28,5	21,2	22,43	24,3	30,22	27,9	31,76	27,41	32,22		
NaH	23,88	34,32	35,7	39,75	40,2	41,75	44,16	42,52	43,78	40,98	43,04		
O ₂	8,35	9,07	10,12	5,55	7,21	5,67	9,54	7,1	10,1	9,51	10,44	10,54	
O ₃	16,44	17,39	18,28	12,01	15,28	11,9	17,71	14,12	18,25	17,6	18,52	20,78	
PH ₃	29,03	25,47	29,42	22,48	23,09	23,07	30,25	26,54	30,79	29,2	30,87	28,59	
PO ₄ ⁻³	52	0	478,59	29,8	86,14	26,17	106,44	36,07	163,04	69,74	1697,11		
SH ₂	21,11	18,7	22,47	13,89	16,02	14,84	23,55	18,68	24,57	22,3	24,94		
SiH ₄	31,4	27,99	31,33	25,51	26,13	26,91	32,26	29,98	32,31	31,17	32,18		
SiO ₂	28,49	26,48	28,94	22,99	25,74	22,66	28,69	25,94	29,65	28,38	29,79		
SO ₂	23,19	23,56	24,73	18,91	21,92	17,62	24,61	20,93	25,03	23,98	25,14	26,20	
SO ₄ ⁻²	39,93	54,48	54,69	27,22	45,46	23,94	-4058,93	31,33	-32,656	47,06	60,54		

Fonte: Do autor (2021)

Tabela 43: Valores de polarizabilidade isotrópica em Bohr³ calculados com o funcional HF

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3	aug pc-3	Exp
BF ₄ ⁻	17,05	18,75	19,4	10,56	14,38	11,93	19,04	15,59	19,55	19,14	19,77	
BH ₄ ⁻	29,99	32,8	33,51	24,66	26,8	23,9	34,73	28,05	35,52	33,04	35,73	
CO ₃ ⁻²	27,21	37,8	40,44	16,06	29,77	15,84	36,1	21,41	38,96	34,22	43,69	
HCO ₃ ⁻	24,28	26,11	27,77	17,08	23,15	16,84	27,13	21,1	27,91	26,96	28,37	
NO ₂ ⁻	19,26	22,94	24,36	12,44	19,48	12,16	23,08	15,32	24,2	22,06	25,36	
NO ₃ ⁻	22,97	25,19	26,77	16,54	22,63	15,83	25,79	19,41	26,73	25,6	27,34	
OH ⁻	10,25	13,97	17,08	5,06	8,89	4,99	15,12	7,42	17,13	13,93	20,98	
AlF ₂ H	19,71	18,43	20,26	14,11	16,35	15,93	20,03	18,51	20,64	20,13	20,78	
AlF ₃	15,41	14,47	16,21	9,72	11,68	11,66	15,68	14,15	16,49	16,1	16,68	
AlFH ₂	24,07	21,83	24,31	18,81	20,21	19,97	24,73	22,79	25,04	24,21	25,11	
AlH ₃	28,99	25,82	28,93	24,13	24,86	24,46	30,25	27,59	30,15	28,92	30,13	
BF ₃	12,17	12,93	13,34	8,64	10,07	9,56	13,05	11,62	13,4	13,23	13,46	16,33
BH ₃	15,51	16,05	16,32	13,63	13,72	14,33	16,62	15,57	16,56	16,26	16,55	
C ₂ H ₄ O ₂	29,21	29,37	30,39	24,44	27,12	24,57	30,31	27,8	30,51	30,24	30,54	34,75
C ₃ H ₆ O ₂	40,17	40,25	41,31	34,42	37,38	34,72	41,27	38,63	41,42	41,2	41,44	46,97
C ₄ H ₆	52,55	52,86	54,55	45,53	50,67	45,28	54,82	49,8	55,02	54,44	55,06	
C ₄ H ₈ O ₂	51,49	51,55	52,66	44,79	48,02	45,18	52,64	49,77	52,78	52,58		
C ₅ H ₁₀ O ₂	62,9	62,94	64,15	55,26	58,78	55,77	64,13	61,01	64,27	64,07		
C ₆ H ₅ OCH ₃	79,6	79,87	81,77	68,38	75,4	69,23	81,93	75,95	82,07	81,72		
C ₆ H ₆	63,78	64,03	66,16	54,51	60,87	54,94	66,41	60,42	66,65	66,11	66,67	67,21
CF ₄	14,49	15,51	16,31	10,39	12,75	10,85	15,92	13,64	16,36	16,12	16,45	19,06
CH ₂ F ₂	14,25	14,61	15,54	10,88	12,31	11,49	15,32	13,61	15,64	15,41	15,71	18,63
CH ₃ F	14,38	14,43	15,4	11,51	12,44	12,07	15,31	13,91	15,52	15,29	15,57	17,14
CH ₄	14,91	14,42	15,68	12,4	12,76	12,79	15,79	14,54	15,85	15,61	15,85	16,52
CHF ₃	14,38	15,09	15,94	10,57	12,53	11,13	15,62	13,58	16,01	15,77	16,09	18,90
CO	11,13	11,26	11,93	9,43	10,47	9,24	11,89	10,71	12,08	11,87	12,09	13,18
CO ₂	13,77	14,02	15,15	11,18	12,53	11,11	14,9	13,11	15,25	14,95	15,34	16,92
F ₂	5,93	6,78	7,54	4,26	5,31	4,36	7,09	5,49	7,55	7,25	7,71	7,83
H ₂	4,02	3,55	4,92	2,21	2,21	2,88	5,05	3,9	5,18	4,87	5,16	
H ₂ CO ₃	21,17	21,43	22,52	16,4	19,2	16,46	22,29	19,65	22,61	22,31	22,69	
H ₂ PO ₄ ⁻	34,13	34,65	36,58	24,94	31,1	24,23	36,38	29,6	36,84	35,68	37,05	
H ₂ SO ₄	28,78	28,92	30,05	24,04	27,22	22,4	30,01	26,45	30,17	29,71	30,18	
H ₃ PO ₄	30,86	30,88	31,85	24,01	27,69	23,8	31,8	28,15	31,99	31,5	32,02	

Continuação da tabela													
HCl	14,06	11,91	15,37	6,52	7,82	8,44	15,44	11,63	16,4	14,18	16,71	16,97	
HF	3,59	3,84	4,62	1,99	2,5	2,32	4,31	3,3	4,67	4,45	4,82	5,40	
HPO ₄ ⁻²	38,48	43,53	46,18	25,41	37,45	24,26	44,76	31,04	46,12	42,41	47,52		
HSO ₄ ⁻	31,15	32,48	34,01	24,11	30,09	22,13	33,65	27,19	34,13	33,11	34,38		
LiH	11,64	11,34	15,91	20,18	20,26	21,84	23,89	23,05	24,15	22,37	24,12		
NaCl	20,54	20,43	24	15,06	16,15	18,65	24,8	22,77	26,41	22,72	27,11		
NaH	19,19	26,04	28,06	29,31	29,51	31,52	34,61	33,53	34,85	31,81	34,52		
O ₂	8,16	8,65	9,52	5,75	7,07	5,84	9,07	7,14	9,54	9,11	9,69	10,54	
O ₃	17,04	17,65	18,42	13,44	16,14	13,04	17,87	15,07	18,4	17,96	18,57	20,78	
PH ₃	27,81	24,54	28,21	21,65	22,29	22,31	29,03	25,48	29,49	27,96	29,52	28,59	
PO ₄ ⁻³	43	74,26	77,47	24,75	50,5	23,15	60,96	31,57	66,67	52,29	105,66		
SH ₂	20,38	17,93	21,52	13,53	15,3	14,51	22,51	18,12	23,47	21,43	23,73		
SiH ₄	28,83	25,57	28,87	24,06	24,57	25,15	29,87	27,77	29,68	28,73	29,58		
SiO ₂	23,89	22,04	24,28	19,49	21,56	19,21	23,96	21,85	24,8	23,78	24,9		
SO ₂	21,07	21,23	22,27	18,1	20,38	16,44	22,18	19,26	22,49	21,68	22,54	26,20	
SO ₄ ⁻²	33,8	39,21	39,6	22,96	34,7	20,96	39,76	27,3	41,16	38,07	42,72		

Fonte: Do autor (2021)

Tabela 44: Valores de polarizabilidade isotrópica em Bohr³ calculados com o funcional MP2

Molécula	MCG	aMCG 2dif	aMCG 3d2fig	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3	Exp
BF ₄ ⁻	19,95	21,74	23,40	12,29	18,02	13,46	22,96	17,74	23,58	22,74	
BH ₄ ⁻	30,86	31,52	35,27	25,21	28,31	23,63	36,93	28,35	37,85	34,50	
CO ₃ ⁻²	33,04		60,97	19,08	42,26	18,13	49,63	24,60	55,17	44,47	
HCO ₃ ⁻	29,09	32,67	34,70	20,29	29,90	19,37	33,83	24,37	34,85	33,05	
NO ₂ ⁻	22,87	29,71	31,34	14,39	25,58	13,67	29,39	17,29	30,85		
NO ₃ ⁻	27,95	32,04	33,95	19,98	29,60	18,63	32,50	22,75	33,75		
OH ⁻	12,29	21,69	25,83	5,54	11,51	5,25	21,40	8,08	24,90	18,33	
AlF ₂ H	22,31	21,37	22,94	16,58	19,39	18,08	22,79	20,75	23,53	22,69	
AlF ₃	18,85	18,34	19,81	12,67	15,55	14,50	19,27	17,11	20,27	19,51	
AlFH ₂	25,68	23,84	25,91	20,60	22,28	21,28	26,49	24,15	26,86		
AlH ₃	29,60	26,80	29,42	25,07	25,96	24,87	31,03	28,07	30,92	29,46	
BF ₃	14,24	14,55	15,81	10,41	12,57	11,04	15,46	13,42	15,87	15,54	16,33
BH ₃	15,66	14,92	16,54	13,91	14,03	14,34	16,88	15,69	16,83	16,44	
C ₂ H ₄ O ₂	32,21	32,54	33,87	26,40	30,35	26,31	33,83	30,14	34,03	33,53	34,75
C ₃ H ₆ O ₂	43,65	43,86		36,67	40,99	36,67	45,29	41,40			46,97
C ₄ H ₆	51,14	51,15	53,52	42,40	48,28	43,23	54,21	48,27	54,25	53,38	
C ₄ H ₈ O ₂	55,56	55,72		47,36	52,12	47,40	57,28	53,01			
C ₆ H ₆	65,15	65,38		55,42	62,89	55,80	68,40	61,59	68,51		67,21
CF ₄	16,59	18,06	19,08	11,77	15,20	12,09	18,45	15,30	19,06	18,64	19,06
CH ₂ F ₂	15,60	16,14	17,34	11,71	13,74	12,30	17,04	14,65	17,46	17,04	18,63
CH ₃ F	15,19	15,27	16,52	11,96	13,21	12,49	16,42	14,53	16,70	16,31	17,14
CH ₄	15,24	14,63	16,14	12,48	12,95	12,76	16,32	14,74	16,38	16,04	16,52
CHF ₃	16,19	17,23	18,32	11,74	14,58	12,21	17,84	14,99	18,36	17,94	18,90
CO	12,07	12,28	13,06	10,36	11,96	9,81	13,10	11,49	13,27		13,18
CO ₂	16,04	16,42	17,79	13,27	15,41	12,76	17,51	15,08	17,91		16,92
F ₂	5,65	6,84	7,88	3,56	5,06	3,78	7,22	5,04	7,84		7,83
H ₂	4,00	3,52	4,92	2,17	2,17	2,86	5,05	3,88	5,18		
H ₂ CO ₃	24,66		26,58	18,99	23,27	18,69	26,33	22,41	26,68	26,12	
H ₂ PO ₄ ⁻	41,08	43,14	45,29	30,26	40,24	28,05	45,20	34,45	45,74		
H ₂ SO ₄	33,99	34,50	35,96	28,61	33,70	25,86	35,91	30,65	36,09		
H ₃ PO ₄	36,43	36,55		28,71	34,50	27,35	38,01	32,51	38,21		
HCl	14,31	12,03	15,73	6,66	8,26	8,38	15,90	11,63	17,04		16,97
HF	3,99	4,35	5,38	2,15	2,92	2,46	4,97	3,57	5,43		5,40

Continuação da tabela												
HPO ₄ ⁻²	47,34	59,93	63,17	31,07	51,78	28,17	59,77	36,34	62,06			
HSO ₄ ⁻	37,24	40,08	42,02	28,74	38,50	25,56	41,60	31,58	42,18			
LiH	12,00	12,49	16,34	24,07	24,16	24,12	25,80	24,69	25,82	23,70		
NaCl	21,96	22,87	26,02	19,06	20,46	21,89	27,78	25,36	29,57	24,71		
NaH	21,51	29,86	31,03	37,44	37,67	37,32	39,39	37,91	39,11	35,46		
O ₂	7,49	8,19	9,36	4,47	6,16	4,85	8,84	6,28	9,35	8,71	10,54	
O ₃	13,38	14,43	15,54	9,04	12,38	9,11	15,09	11,13	15,53	14,75	20,78	
PH ₃	28,21	24,90	28,47	22,17	22,83	22,26	29,66	25,60	30,08	28,24	28,59	
PO ₄ ⁻³	53,03		146,60	29,66	78,00	26,47	91,10	36,52	105,18	69,58		
SH ₂	20,53	18,15	21,72	13,71	15,90	14,28	23,02	18,02	24,08	21,58		
SiH ₄	29,53	28,85	29,50	24,41	24,98	25,45	30,69	28,25	30,48	29,31		
SiO ₂	30,83	30,60	31,26	25,72	29,36	24,41	31,14	27,84	32,20	30,49		
SO ₂	24,03	24,51	25,71	19,19	22,93	18,13	25,73	21,50	26,09	24,80	26,20	
SO ₄ ⁻²	40,58	52,27	52,45	26,61	46,33	23,87	51,71	31,37	54,02	47,54		

Fonte: Do autor (2021)

4.3.5 Tempo Computacional

Se tratando de recursos computacionais finitos, o tempo necessário para a realização dos cálculos pode ser crucial para a escolha entre os conjuntos de base da literatura e os métodos computacionais disponíveis, visando sempre o compromisso entre tempo computacional e a precisão dos resultados.

Até agora foi apresentado como os conjuntos de base aMCG (2d1f e 3d2f1g) foram gerados através de uma nova metodologia, pMCG-HF partindo de um átomo em ambiente aniônico, desde a escolha das malhas até a etapa de contração e polarização. Após a finalização do processo de geração desses conjuntos, foram testadas diversas propriedades como a capacidade de prever geometrias moleculares, energia total da molécula, momento dipolo e polarizabilidade, analisada sob a perspectiva de diferentes funcionais e ainda os métodos HF e MP2, e ainda utilizando diferentes conjuntos de base da literatura para comparação, além dos resultados experimentais quando possível e agora serão analisados o custo computacional para obter os resultados dessas propriedades.

Espera-se que o tempo computacional varie de acordo com o método utilizado, quanto mais robusto o método maior o tempo necessário para calculá-lo, assim como uma maior quantidade de funções presentes no conjunto de base culminará em maiores tempos computacionais.

Da mesma forma, a adição de funções de polarização e o tipo de funções usadas (p , d , f e g) irão influenciar diretamente nessa medida, uma vez que a quantidade real de funções calculadas aumenta conforme o número quântico magnético, ou seja, funções tipo p se desdobram em 3 (p_x , p_y e p_z), as tipo d em 5 (d_{xy} , d_{yz} , d_{xz} , $d_{x^2-y^2}$ e d_{z^2}) e assim sucessivamente.

Todos os cálculos tipo *single point* foram realizados utilizando 8 processadores e 16 GB de memória em um nó isolado com 40 processadores. A separação de um nó exclusivo para esses cálculos é determinante para garantir a confiabilidade dos tempos obtidos, pois isso assegura que o acesso de outros usuários não irá influenciar nos tempos computacionais. Ressalta-se que até a etapa de "qualificação" deste trabalho, o isolamento de um nó não havia sido considerado, portanto, grande parte dos testes moleculares foram refeitos para garantir que os resultados de tempo computacionais fossem confiáveis. Os tempos descritos nas tabelas a seguir são retirados diretamente do arquivo *output* do programa Gaussian 09 e portanto, descrevem o tempo computacional de apenas 1 processador, como o *default* do programa.

Comparando os tempos para cálculos B3LYP-sp, tabela 45, e B3LYP-opt, tabela 46, observa-se que, de fato, realizar cálculos que envolvem otimização são mais custosos que os *single point*, principalmente quando se tratam de moléculas grandes e/ou de conjuntos de base maiores e com muitas funções de polarização. Em relação tempo computacional

vs acurácia, observa-se que para o grupo de moléculas selecionadas e o funcional B3LYP, a utilização de um critério de precisão maior (otimização com *integral=ultrafine*) não proporcionou grandes ganhos para a descrição de propriedades, apenas proporcionou aumento no tempo computacional.

Os conjuntos de base mais simples como 6-311G e 6-311G+ apresentaram os menores tempos computacionais em todos os casos, porém a descrição de propriedades como energia molecular total, momento dipolo e polarizabilidade foram prejudicadas. A predição de geometria das moléculas selecionadas com esses conjuntos de base, no entanto, foram bem sucedida indicando que esses conjuntos são interessantes para iniciar a busca por geometrias e de fato. A combinação 6-311G juntamente com funcional B3LYP é amplamente aplicada na literatura com esse intuito, por mais que haja controversas quanto essa abordagem, principalmente para cálculos mais delicados como para a distinção de estereoisômeros ou moléculas mais complexas.

Em contraponto, os maiores conjuntos de base como aMCG-3d2f1g, aug-cc-pVTZ, pc-3 e aug-pc3, apesar de se destacarem em diversas propriedades físico-químicas provendo alta precisão dos resultados, também se revelaram os mais custosos computacionalmente, enfatizando o compromisso entre tempo computacional e acurácia.

Comparando apenas os três conjuntos de base mais polarizados aMCG (3d2f1g), aug-cc-pVTZ (3d,2f) e aug-pc-3 (5d,3f,2g), é possível afirmar que o conjunto aug-pc-3 foi o mais custoso computacionalmente. Fato pode ser atribuído à forma de contração (4Z) e a maior quantidade de funções polarização, contribuindo para o aumento do tempo computacional e também melhorando a descrição de propriedades como polarizabilidade.

Entretanto, os conjuntos de base aMCG-3d2f1g e aug-cc-pVTZ, apesar de possuírem formas de contrações diferentes (5Z e TZ respectivamente), descreveram as propriedades físico-químicas selecionadas de forma semelhante, porém com uma vantagem em tempo computacional para o conjunto aug-cc-pVTZ. Portanto, recomenda-se realizar um estudo mais aprofundado sobre a influência da inclusão do orbital tipo "g" como função de polarização para descrição de propriedades *vs.* tempo computacional.

O método MP2, tabela 51, apresentou os maiores tempos computacionais, mesmo para cálculos tipo *single point*, que comumente são mais rápidos. Por mais que esse seja um resultado esperado, isso inviabilizou a aplicação de testes com conjuntos de base ainda maiores, como o aug-pc-3. Entretanto, essa é uma opção menos custosa que os métodos CISD e CCSD(T), que não foram possíveis de serem realizados devido ao alto custo computacional.

De forma geral, comparando os conjuntos de base gerados com o pMCG-HF (MCG, aMCG-2d1f e aMCG-3d2f1g), observa-se o conjunto de base MCG foi aquele que apresentou o menor tempo computacional, além de realizar uma boa predição da geometria e energia.

Para cálculos de momento dipolo, no entanto, o conjunto de base aMCG-2d1f obteve o melhor desempenho no geral. A necessidade de utilizar uma maior quantidade de expoentes para descrever a propriedade polarizabilidade fez com que o conjunto de base aMCG-3d2f1g se sobressaísse, apesar do grande impacto no tempo computacional.

Tabela 45: Tempo computacionais para cálculos com o funcional B3LYP-sp

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2flg	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3	aug pc-3
BF ₄ ⁻	2'7,0"	3'45,2"	10'57,5"	25,0"	33,8"	27,0"	1'7,4"	1'18,7"	3'45,2"	10'28,8"	2h4'3,3"
BH ₄ ⁻	45,1"	1'45,4"	3'49,4"	20,2"	16,4"	22,1"	26,9"	39,3"	1'11,6"	3'2,1"	8'12,1"
CO ₃ ²⁻	1'45,5"	2'17,8"	11'47,9"	17,6"	22,9"	22,9"	39,7"	1'52,7"	3'37,3"	12'39,0"	3h13'18,0"
HCO ₃ ⁻	3'26,6"	5'24,3"	29'13,1"	24,0"	53,3"	30,6"	1'38,2"	2'16,9"	8'24,3"	30'4,0"	3h33'4,4"
NO ₂ ⁻	53,3"	2'8,2"	4'28,3"	16,8"	23,3"	19,2"	25,8"	40,2"	1'30,3"	5'8,7"	15'52,2"
NO ₃ ⁻	1'23,5"	3'10,5"	6'58,8"	19,0"	19,1"	22,0"	53,7"	1'19,3"	2'49,8"	8'7,3"	56'30,4"
OH ⁻	27,9"	1'16,3"	2'8,9"	14,3"	13,1"	15,8"	18,9"	26,3"	35,8"	1'23,7"	4'21,8"
AlF ₂ H	1'59,4"	1'30,8"	8'39,5"	19,0"	18,9"	23,2"	1'20,2"	56,0"	2'50,2"	6'42,0"	25'48,4"
AlF ₃	1'44,9"	1'41,6"	8'48,0"	19,9"	20,8"	23,6"	34,4"	1'22,8"	2'58,2"	6'52,5"	52'43,4"
AlFH ₂	1'49,0"	1'6,8"	6'39,3"	19,0"	17,0"	21,5"	26,6"	47,2"	1'58,0"	4'59,8"	18'7,9"
AlH ₃	47,8"	38,8"	2'56,3"	15,4"	14,0"	19,6"	22,6"	1'19,6"	1'12,3"	2'56,6"	6'34,5"
BF ₃	1'16,9"	2'40,9"	8'43,7"	18,1"	18,3"	21,6"	31,8"	55,3"	2'19,4"	7'14,5"	53'55,9"
BH ₃	35,0"	1'22,5"	3'0,7"	15,6"	13,6"	22,1"	20,0"	32,9"	50,1"	2'23,5"	6'15,0"
C ₂ H ₄ O ₂	7'32,9"	18'23,2"	1h58'38,8"	32,9"	41,1"	49,8"	2'4,7"	4'34,5"	19'41,4"	1h46'11,0"	8h57'50,8"
C ₃ H ₆ O ₂	18'41,3"	39'49,6"	5h34'45,5"	54,8"	1'19,9"	1'48,1"	4'51,4"	10'33,3"	1h23'22,0"	4h45'53,1"	1d11h55'51,8"
C ₄ H ₆	7'12,9"	18'35,3"	2h15'13,4"	30,9"	41,1"	1'5,9"	2'4,4"	5'0,3"	22'26,0"	1h55'29,5"	1d11h46'44,3"
C ₄ H ₈ O ₂	54'11,6"	1h43'31,7"	12h26'35,4"	1'27,8"	2'19,8"	3'3,4"	9'34,1"	20'38,8"	3h12'22,0"	10h32'25,9"	
C ₅ H ₁₀ O ₂	1h35'26,1"	4h16'58,5"	23h34'55,0"	2'30,1"	4'16,1"	3'55,3"	16'38,3"	51'57,8"	6h4'40,5"	19h24'55,7"	
C ₆ H ₅ OCH ₃	2h27'38,8"	8h2'27,1"	1d9h46'30,4"	3'41,7"	6'46,2"	6'26,5"	26'25,9"	54'21,6"	8h42'23,9"	1d3h28'14,0"	
C ₆ H ₆	12'1,1"	27'53,7"	4h45'57,9"	42,2"	1'1,4"	1'6,2"	3'52,8"	7'54,6"	1h12'12,7"	4h36'27,0"	
CF ₄	2'35,3"	6'6,6"	10'31,5"	22,6"	34,0"	27,9"	1'6,0"	1'24,0"	3'45,3"	11'5,7"	2h20,3"
CH ₂ F ₂	1'37,7"	4'46,3"	9'19,2"	18,1"	40,1"	22,0"	34,4"	1'25,1"	2'53,3"	9'25,2"	1h15'4,6"
CH ₃ F	1'22,9"	2'7,5"	7'31,6"	18,3"	17,0"	26,3"	34,5"	55,1"	2'55,2"	7'25,3"	58'56,5"
CH ₄	58,1"	1'38,0"	3'38,5"	16,8"	15,4"	19,4"	40,9"	43,8"	1'11,4"	3'28,2"	9'1,7"
CHF ₃	2'20,0"	6'22,6"	12'45,4"	20,9"	22,6"	26,3"	47,8"	1'24,2"	4'24,0"	13'53,7"	1h39'33,5"
CO	34,7"	1'41,3"	2'16,3"	18,3"	12,8"	17,5"	17,7"	30,5"	58,0"	2'18,9"	6'13,2"
CO ₂	54,6"	2'5,9"	4'8,6"	16,6"	14,7"	18,9"	23,3"	37,2"	1'43,8"	4'22,9"	15'9,8"
F ₂	32,0"	1'29,6"	1'39,6"	30,6"	12,6"	16,8"	18,9"	33,8"	37,6"	1'57,2"	3'42,8"
H ₂	17,0"	20,9"	40,5"	12,3"	10,9"	12,7"	13,4"	15,2"	16,0"	25,5"	35,0"
H ₂ CO ₃	3'43,4"	7'42,6"	24'55,4"	23,6"	26,4"	28,3"	1'36,9"	1'58,3"	7'32,4"	24'36,8"	3h11'36,7"
H ₂ PO ₄ ⁻	13'31,0"	12'47,7"	2h38'54,7"	1'18,2"	1'10,4"	1'8,3"	3'14,7"	6'20,1"	27'24,0"	2h16'36,3"	15h26'34,4"
H ₂ SO ₄	9'21,5"	20'34,8"	1h47'0,2"	54,7"	51,5"	1'14,5"	2'9,3"	4'26,0"	17'45,2"	1h38'13,7"	7h55'20,7"
H ₃ PO ₄	9'40,9"	8'25,2"	1h44'20,8"	1'43,7"	49,1"	50,1"	2'11,6"	4'6,4"	16'4,2"	1h41'27,5"	11h6'24,9"

Continuação da tabela											
HCl	41,0"	1'43,9"	1'36,8"	13,9"	13,1"	16,5"	18,7"	29,0"	35,9"	1'29,6"	2'55,4"
HF	27,2"	1'14,9"	1'37,3"	14,8"	14,7"	16,2"	16,9"	26,3"	30,9"	1'23,5"	2'41,9"
HPO ⁻² ₄	10'48,1"	10'22,3"	1h14'0,8"	1'1,9"	59,5"	55,3"	2'34,0"	5'4,0"	21'13,7"	1h0'53,3"	126'53,9"
HSO ⁻ ₄	10'52,4"	16'4,1"	1h7'28,4"	39,8"	58,0"	54,7"	2'30,3"	5'22,1"	19'58,2"	1h2'43,7"	8h216,2"
LiH	15,4"	17,4"	1'4,9"	21,1"	12,1"	14,9"	31,0"	32,4"	34,8"	35,5"	1'2,5"
NaCl	17,8"	44,5"	2'28,4"	15,9"	15,1"	19,3"	22,9"	42,4"	1'2,1"	1'35,8"	3'32,3"
NaH	34,1"	49,3"	1'41,5"	14,1"	12,9"	17,4"	18,0"	30,4"	56,8"	35,5"	50,8"
O ₂	29,8"	33,3"	1'38,3"	14,4"	13,2"	17,4"	18,0"	29,0"	41,5"	1'49,2"	4'6,3"
O ₃	53,4"	2'3,6"	4'17,1"	15,2"	15,7"	19,7"	25,5"	1'1,0"	1'59,8"	4'44,0"	15'25,8"
PH ₃	54,6"	41,4"	2'38,9"	14,0"	16,3"	20,1"	23,6"	36,4"	1'7,0"	2'54,3"	150,6"
PO ⁻³ ₄	2'51,1"	7'49,0"	53'27,5"	1'8,0"	29,5"	26,3"	55,6"	1'27,6"	4'42,8"	11'23,5"	
SH ₂	42,5"	32,4"	1'54,3"	13,2"	16,5"	18,0"	20,1"	32,8"	43,7"	1'59,1"	4'37,2"
SiH ₄	1'2,5"	48,4"	3'2,8"	15,1"	20,1"	20,0"	26,4"	42,2"	1'18,9"	3'10,3"	9'2,4"
SiO ₂	1'12,1"	56,2"	4'24,2"	15,9"	20,0"	21,4"	27,0"	41,6"	1'29,2"	4'46,6"	14'31,8"
SO ₂	1'52,8"	1'5,3"	4'40,5"	16,6"	17,7"	48,5"	28,9"	45,7"	1'41,0"	4'52,9"	16'5,5"
SO ⁻² ₄	2'53,4"	2'51,0"	10'45,8"	23,1"	29,9"	30,3"	54,0"	1'34,7"	4'35,1"	11'39,4"	2h35'47,8"

Fonte: Do autor(2021)

Tabela 46: Tempo computacionais para cálculos com o funcional B3LYP-opt

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2flg	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3
BF ₄ ⁻	4'56,8"	23'41,7"	6'10,1"	48,1"	1'9,4"	1'41,3"	2'13,0"	4'57,8"	12'41,3"	22'9,9"
BH ₄ ⁻	1'18,6"	10'41,4"	3'12,5"	35,9"	38,2"	48,1"	1'4,5"	2'36,3"	4'53,1"	10'5,7"
CO ₃ ²⁻	2'54,3"	21'35,5"	4'32,0"	38,5"	54,3"	1'21,9"	1'31,6"	3'15,4"	10'24,8"	35'12,3"
HCO ₃ ⁻	5'24,3"	48'17,6"	8'36,0"	1'26,3"	1'14,6"	1'15,6"	2'52,4"	6'33,6"	22'31,8"	51'10,8"
NO ₂ ⁻	2'8,2"	8'58,7"	2'50,1"	33,3"	41,6"	46,4"	1'26,8"	2'13,8"	4'48,1"	9'58,3"
NO ₃ ⁻	3'10,5"	15'8,9"	5'25,9"	43,8"	59,5"	1'2,0"	4'52,1"	5'32,4"	11'12,5"	16'15,3"
OH ⁻	1'16,3"	4'2,3"	1'21,9"	30,5"	31,7"	37,4"	53,9"	1'21,3"	2'7,0"	5'10,2"
AlF ₂ H	7'54,5"	16'33,6"	4'51,2"	39,2"	52,6"	56,7"	2'6,6"	2'39,1"	8'9,9"	15'9,2"
AlF ₃	8'16,1"	14'13,7"	5'22,8"	1'7,7"	55,9"	58,5"	1'46,4"	2'40,1"	7'39,0"	13'36,2"
AlFH ₂	5'51,6"	12'6,1"	3'41,8"	37,2"	44,2"	54,2"	1'27,9"	2'32,4"	5'15,7"	10'40,8"
AlH ₃	5'10,3"	6'57,0"	2'40,8"	37,0"	41,0"	49,6"	1'29,7"	2'14,5"	4'44,6"	8'40,1"
BF ₃	3'21,8"	13'56,5"	3'56,4"	42,9"	54,6"	54,3"	1'52,3"	2'57,2"	7'50,1"	33'36,4"
BH ₃	1'27,4"	6'38,1"	3'6,8"	31,0"	35,9"	51,1"	1'49,3"	1'50,1"	3'11,3"	7'7,0"
C ₂ H ₄ O ₂	18'23,2"	2h4'32,3"	24'3,6"	1'41,2"	2'48,0"	2'39,4"	10'50,8"	21,1"	1h22'48,2"	2h23'3,2"
C ₃ H ₆ O ₂	39'49,6"	7h10'7,5"	1h2'44,7"	3'15,3"	5'19,4"	5'16,0"	27'17,4"	49'19,6"	3h15'59,4"	7h28'54,0"
C ₄ H ₆	18'35,3"	2h50'23,8"	29'45,6"	1'47,1"	3'36,6"	2'31,6"	12'13,7"	23'19,7"	1h36'46,7"	3h37'28,5"
C ₄ H ₈ O ₂	1h43'31,7"	14h53'26,1"	1h58'42,8"	5'6,8"	9'51,6"	9'23,4"	48'22,6"	1h28'7,1"	5h21'23,7"	15h26'35,0"
C ₅ H ₁₀ O ₂	4h16'58,5"	1d4h12'54,2"	3h24'57,5"	9'14,2"	14'52,5"	14'27,0"	1h35'33,3"	2h24'5,3"	10h20'37,4"	1d3h50'8,0"
C ₆ H ₅ OCH ₃	8h2'27,1"	1d15h43'30,5"	3h37'44,4"	10'8,0"	16'0,2"	16'8,0"	1h25'19,5"	2h21'26,3"	14h7'33,4"	1d6h47'55,4"
C ₆ H ₆	27'53,7"	5h25'5,5"	22'12,8"	1'54,0"	3'42,5"	2'37,0"	10'29,2"	14'53,9"	1h37'49,4"	4h0'49,6"
CF ₄	6'6,6"	23'14,3"	6'41,6"	55,4"	1'11,9"	1'16,0"	3'31,4"	6'25,8"	9'12,7"	23'0,5"
CH ₂ F ₂	4'46,3"	18'30,6"	4'26,3"	1'25,8"	46,6"	56,7"	1'44,1"	3'18,4"	6'1,7"	18'11,3"
CH ₃ F	2'7,5"	15'56,1"	3'42,8"	42,1"	44,3"	55,2"	2'27,0"	3'12,7"	6'21,1"	15'0,0"
CH ₄	1'38,0"	10'29,4"	3'10,0"	51,6"	41,6"	49,0"	1'9,3"	2'39,3"	4'13,6"	10'15,3"
CHF ₃	6'22,6"	25'56,2"	9'23,2"	54,2"	1'1,5"	1'20,0"	3'25,6"	4'38,5"	9'6,6"	25'20,6"
CO	1'41,3"	5'20,8"	3'30,2"	31,2"	32,0"	40,4"	59,6"	1'29,1"	1'58,3"	6'6,6"
CO ₂	2'5,9"	8'14,0"	3'1,0"	1'17,9"	38,7"	46,5"	1'34,0"	2'3,0"	4'18,0"	9'43,6"
F ₂	1'29,6"	4'23,2"	2'56,7"	31,8"	1'10,6"	40,2"	1'2,0"	1'23,1"	1'40,7"	5'1,6"
H ₂	0'20,9"	1'49,5"	1'7,8"	22,6"	22,9"	29,7"	51,3"	38,0"	0'40,2"	1'11,6"
H ₂ CO ₃	7'42,6"	44'49,2"	8'14,4"	49,1"	1'14,5"	1'16,9"	3'37,9"	5'53,4"	24'31,8"	42'56,4"
H ₂ PO ₄ ⁻	25'38,7"	2h46'2,2"	33'58,4"	3'23,1"	2'27,5"	2'45,9"	13'16,6"	16'29,4"	51'38,1"	2h19'54,3"
H ₂ SO ₄	20'34,8"	1h43'54,3"	33'54,3"			2'47,4"				2h24'49,0"
H ₃ PO ₄	25'7,2"	1h29'35,4"	40'46,2"	2'22,6"	2'52,2"	3'16,8"	14'0,0"	21'22,4"	1h4'10,8"	2h55'5,9"

Continuação da tabela											
HCl	1°43,9"	4°38,0"	1°58,7"	2°50,9"	2°52,6"	3°25,7"	14°55,9"	21°47,3"	1h3°48,5"	5°18,3"	
HF	1°14,9"	4°22,8"	1°25,6"	30,5"	29,1"	38,6"	59,3"	1°20,4"	1°28,5"	4°31,4"	
HPO_4^{-2}	46°14,8"	42°1,8"	25°46,9"	2°2,2"	2°5,0"	2°29,0"	9°43,5"	15°24,3"	3°7,3,6"	1h45°45,2"	
HSO_4^-	16°4,1"	2h4°33,3"	26°8,2"	2°49,5"	3°20,5"	3°1,7"	9°43,7"	16°44,2"	38°11,9"	1h50°10,9"	
LiH	0°17,4"	3°21,8"	40,3"	28,9"	28,7"	39,2"	1°0,7"	1°39,4"	1°21,9"	1°26,2"	
NaCl	0°44,5"	7°23,9"	3°15,5"	31,6"	33,7"	49,7"	1°12,0"	2°26,4"	2°41,4"	5°27,8"	
NaH	0°49,3"	4°18,9"	1°39,9"	27,8"	29,7"	42,4"	1°2,4"	1°41,7"	1°43,7"	2°21,2"	
O ₂	0°33,3"	4°25,8"	1°36,1"	23,4"	38,1"	1°8,8"	1°48,0"	1°54,3"	2°0,9"	5°34,6"	
O ₃	2°3,6"	10°23,5"	2°44,5"	36,3"	36,5"	46,5"	1°29,5"	2°36,3"	3°49,3"	10°10,4"	
PH ₃	1°46,1"	7°5,7"	4°9,0"	33,3"	34,5"	49,3"	1°38,5"	2°33,1"	2°59,1"	10°54,8"	
PO_4^{-3}	5°36,8"	1h0°39,6"	9°23,4"	1°2,5"	1°10,5"	1°21,5"	4°23,5"	5°48,5"	9°58,2"	23°36,1"	
SH ₂	0°32,4"	5°38,0"	2°13,5"	30,0"	32,3"	44,3"	1°8,0"	1°59,8"	2°20,9"	5°35,1"	
SiH ₄	0°47,2"	8°58,7"	5°58,0"	41,9"	44,8"	1°4,1"	2°34,8"	4°24,4"	6°29,1"	16°54,2"	
SiO ₂	1°25,0"	8°57,2"	3°11,1"	38,7"	40,9"	51,6"	1°39,1"	2°52,8"	3°9,7"	9°3,7"	
SO ₂	1°5,3"	10°3,9"	3°46,1"	40,2"	41,6"	53,5"	1°40,5"	3°4,6"	4°12,2"	11°4,5"	
SO_4^{-2}	2°51,0"	22°57,0"	9°0,5"	1°3,9"	1°10,3"	1°28,8"	3°57,2"	6°36,8"	10°25,0"	23°35,4"	

Fonte: Do autor(2021)

Tabela 47: Tempo computacionais para cálculos tipo (*single point*) com o funcional BLYP

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2flg	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3	aug pc-3
BF ₄ ⁻	1'52,2"	2'22,7"	9'57,6"	19,3"	25,2"	26,0"	46,6"	1'43,0"	47,5"	10'18,7"	1h14'24,7"
BH ₄ ⁻	44,4"	0'48,6"	3'20,3"	15,2"	21,7"	19,1"	39,2"	47,9"	23,5"	2'58,4"	8'26,0"
CO ₃ ⁻²											
HCO ₃ ⁻	3'20,8"	4'10,6"	27'3,8"	52,1"	26,3"	2'9,5"	1'3,8"	2'23,4"	1'2,2"	29'21,2"	2h24'45,5"
NO ₂ ⁻	52,4"	57,1"	4'4,0"	13,9"	15,9"	18,6"	23,1"	36,9"	25,1"	4'31,4"	14'44,0"
NO ₃ ⁻	1'19,5"	1'45,9"	8'41,1"	18,0"	19,8"	20,3"	31,3"	54,5"	29,1"	8'9,6"	39'35,7"
OH ⁻	27,4"	27,4"	1'36,7"	21,5"	12,8"	19,8"	17,7"	23,4"	20,1"	1'24,7"	2'57,8"
AlF ₂ H	1'52,3"	1'45,8"	8'18,3"	17,5"	23,3"	22,7"	1'8,3"	1'23,9"	32,0"	7'43,7"	27'28,6"
AlF ₃	1'42,4"	1'51,6"	7'0,1"	16,9"	29,8"	20,2"	31,9"	1'1,7"	32,7"	6'56,2"	33'13,0"
AlFH ₂	1'28,8"	1'26,9"	6'10,5"	18,3"	17,4"	19,6"	27,9"	1'8,3"	27,8"	6'36,4"	18'45,8"
AlH ₃	47,4"	40,0"	2'37,4"	12,8"	13,6"	16,0"	20,7"	42,3"	21,3"	2'28,9"	6'0,8"
BF ₃	1'16,2"	1'27,8"	6'23,3"	17,6"	17,8"	21,2"	30,1"	1'55,3"	31,5"	6'57,3"	34'21,2"
BH ₃	34,2"	0'34,8"	2'31,3"	13,2"	12,8"	16,9"	19,3"	29,0"	19,8"	2'16,2"	5'50,6"
C ₂ H ₄ O ₂	7'3,2"	8'36,5"	1h36'7,6"	29,6"	40,0"	44,9"	1'58,5"	4'16,8"	2'24,1"	1h20'30,4"	6h34'12,4"
C ₃ H ₆ O ₂	17'11,4"	21'5,5"	4h12'59,0"	50,5"	1'18,2"	1'25,1"	4'38,0"	10'7,1"	4'55,3"	3h27'4,5"	21h1'35,6"
C ₄ H ₆	6'32,0"	7'36,7"	1h29'41,5"	27,9"	46,3"	57,6"	1'57,1"	4'6,5"	2'2,5"	1h16'13,7"	7h40'28,3"
C ₄ H ₈ O ₂	41'9,5"	56'25,0"	8h35'11,0"	1'23,5"	2'20,7"	2'38,3"	8'60,0"	19'14,7"	9'9,0"	6h41'8,3"	
C ₅ H ₁₀ O ₂	1h8'41,2"	1h45'18,4"	15h19'37,0"	2'18,3"	3'42,6"	3'44,2"	15'37,8"	39'25,2"	15'35,0"	11h31'21,7"	
C ₆ H ₅ OCH ₃	1h41'26,1"	3h21'48,1"	19h35'5,4"	3'34,3"	6'43,4"	6'19,1"	25'36,7"	49'57,2"	25'11,7"		
C ₆ H ₆	35'0,7"	43'13,3"	7h32'4,9"	1'43,9"	2'57,8"	2'54,2"	10'4,2"	21'39,9"	10'30,1"	6h13'9,7"	5d7h19'47,0"
CF ₄	2'15,3"	2'49,7"	10'7,5"	21,6"	51,5"	42,6"	45,0"	2'21,0"	46,4"	10'54,5"	1h18'2,8"
CH ₂ F ₂	1'37,5"	1'46,4"	8'52,8"	15,1"	17,1"	22,2"	32,1"	1'14,5"	52,0"	8'40,0"	54'23,9"
CH ₃ F	1'37,2"	1'46,6"	7'5,5"	15,6"	27,7"	33,9"	29,7"	51,4"	28,0"	6'59,5"	47'42,0"
CH ₄	44,7"	51,9"	3'23,0"	15,3"	40,7"	19,0"	24,0"	59,7"	21,4"	3'12,0"	8'20,2"
CHF ₃	2'36,9"	2'50,8"	12'30,5"	19,7"	23,2"	25,9"	44,0"	1'38,5"	43,7"	13'29,4"	1h12'53,1"
CO	32,4"	36,0"	1'59,3"	12,8"	32,3"	16,8"	17,7"	26,0"	15,5"	2'23,6"	5'54,6"
CO ₂	44,8"	52,3"	3'35,1"	14,1"	14,9"	18,1"	23,0"	34,1"	20,7"	4'0,6"	12'40,8"
F ₂	30,4"	34,6"	1'38,2"	12,0"	12,1"	16,6"	16,8"	24,6"	16,5"	1'38,1"	3'32,1"
H ₂	15,2"	15,3"	39,2"	9,2"	15,3"	12,6"	12,1"	13,2"	12,8"	22,2"	34,5"
H ₂ CO ₃	2'56,2"	3'47,8"	23'33,4"	21,7"	25,2"	27,4"	56,8"	1'55,2"	57,8"	23'47,3"	2h13'8,0"
H ₂ PO ₄ ⁻	12'52,0"	13'4,2"	2h4'0,3"	1'56,6"	1'28,6"	1'5,5"	3'13,4"	5'54,8"	3'52,4"	1h38'27,7"	8h12'0,0"
H ₂ SO ₄	12'34,7"	13'5,9"	2h3'59,8"	44,1"	1'17,0"	1'10,2"	3'39,2"	5'58,6"	3'3,2"	1h40'58,5"	8h4'59,3"
H ₃ PO ₄	15'43,7"	7'57,0"	2h37'41,1"	1'4,8"	1'18,5"	1'19,0"	4'7,3"	7'21,4"	3'44,0"	2h0'24,3"	10h13'52,0"

Continuação da tabela											
HCl	32,1"	50,4"	1'30,9"	11,8"	12,6"	16,9"	15,3"	27,5"	15,3"	1'37,4"	2'53,3"
HF	24,6"	29,9"	1'36,8"	11,5"	12,2"	15,4"	14,4"	23,4"	15,4"	1'20,5"	2'35,6"
HPO ₄ ⁻²											
HSO ₄ ⁻	9'43,3"	121,8"	1h3'31,1"	57,4"	56,7"	54,3"	2'31,9"	4'47,2"	2'26,4"	56'43,5"	5h53'39,5"
LiH	14,3"	16,2"	1'4,1"	13,0"	12,4"	15,8"	14,4"	23,3"	16,4"	29,3"	43,3"
NaCl	1'3,0"	50,2"	2'24,1"	13,5"	14,8"	18,8"	21,3"	46,2"	21,4"	1'32,6"	3'2,9"
NaH	30,4"	44,5"	1'35,0"	12,0"	13,5"	17,0"	15,5"	28,0"	17,1"	33,8"	
O ₂											
O ₃	49,7"	58,7"	4'0,3"	30,8"	15,9"	18,8"	21,6"	37,0"	23,8"	4'32,9"	14'23,9"
PH ₃	1'5,3"	43,8"	2'38,2"	13,6"	15,9"	17,7"	22,3"	49,9"	22,6"	2'53,2"	10'34,0"
PO ₄ ⁻³											
SH ₂	39,2"	54,9"	2'16,3"	11,9"	13,6"	17,1"	18,6"	47,6"	19,8"	1'57,3"	4'37,2"
SH ₄	1'49,1"	1'32,7"	7'29,4"	15,9"	18,8"	24,9"	31,8"	1'2,4"	34,0"	7'21,7"	27'19,1"
SiO ₂	1'16,7"	58,6"	4'21,5"	15,8"	17,5"	20,0"	22,7"	37,9"	25,4"	3'50,2"	12'45,1"
SO ₂	1'18,7"	1'7,2"	4'48,4"	16,9"	18,0"	20,3"	24,4"	41,7"	28,0"	4'39,4"	15'1,0"
SO ₄ ⁻²	2'48,8"	2'37,8"	10'37,0"	23,9"	29,9"	28,8"	52,4"	1'50,0"	52,9"	11'11,0"	1h35'22,4"

Fonte: Do autor(2021)

Tabela 48: Tempo computacionais para cálculos tipo (*single point*) com o funcional BHHLYP

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2flg	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3	aug pc-3
BF ₄ ⁻	1'56,1"	3'45,9"	10'5,9"	21,9"	21,9"	26,9"	49,0"	1'41,2"	3'44,3"	11'42,8"	1h57'58,6"
BH ₄ ⁻	45,3"	1'42,9"	3'25,0"	32,9"	32,9"	20,9"	24,1"	37,2"	1'11,2"	3'10,8"	8'10,9"
CO ₃ ⁻²	1'25,7"	1'38,3"	7'5,1"	18,3"	18,3"	22,8"	33,2"	1'10,8"	2'31,4"	7'47,1"	1h45'11,1"
HCO ₃ ⁻	3'6,2"	3'52,8"	19'45,6"	22,4"	22,4"	30,5"	57,4"	2'15,0"	6'36,4"	21'47,2"	2h41'1,9"
NO ₂ ⁻	56,0"	59,7"	4'14,2"	15,1"	15,1"	24,4"	25,3"	39,6"	1'35,2"	5'29,0"	15'54,3"
NO ₃ ⁻	1'25,1"	1'36,3"	6'53,8"	17,5"	17,5"	22,8"	40,7"	57,0"	2'30,3"	8'35,2"	56'37,8"
OH ⁻	28,1"	42,6"	1'31,5"	13,4"	13,4"	16,4"	16,8"	25,7"	31,6"	1'22,9"	3'4,1"
AlF ₂ H		1'36,9"	7'51,0"	18,7"	18,7"	23,1"	32,3"	51,8"	2'28,2"	7'44,4"	26'5,5"
AlF ₃	1'60,0"	1'47,7"	7'17,3"	18,9"	18,9"	24,2"	57,3"	54,6"	2'28,4"	6'57,0"	52'58,3"
AlFH ₂	1'20,8"	1'11,8"	5'45,3"	17,1"	17,1"	22,0"	27,5"	44,0"	2'1,5"	5'4,1"	17'51,5"
AlH ₃	50,8"	41,8"	2'42,1"	14,1"	14,1"	20,6"	22,6"	33,3"	55,4"	2'30,5"	6'32,1"
BF ₃	1'21,2"	2'43,3"	6'37,5"	16,9"	16,9"	31,3"	31,9"	1'25,6"	2'19,9"	7'21,2"	51'58,7"
BH ₃	34,8"	1'24,2"	2'43,1"	14,3"	14,3"	35,5"	19,4"	30,3"	49,2"	2'23,3"	6'30,1"
C ₂ H ₄ O ₂	8'30,1"	11'55,6"	2h33'57,8"	41,0"	41,0"	1'4,0"	2'50,8"	6'4,1"	25'22,5"	2h13'36,2"	11h29'12,7"
C ₃ H ₆ O ₂	28'41,9"	30'39,0"	7h35'11,5"	1'19,1"	1'19,1"	2'19,5"	7'6,3"	15'55,0"	1h533,1"	6h12'49,7"	2d2h55'57,7"
C ₄ H ₆	11'9,6"	11'53,0"	3h56'49,7"	39,8"	39,8"	1'3,2"	3'16,6"	6'57,9"	57'58,8"	3h23'13,3"	1d18h25'19,9"
C ₄ H ₈ O ₂	59'20,5"	1h1'10,1"	16h40'5,2"	2'38,5"	2'38,5"	3'55,1"	15'8,3"	29'31,2"	4h9'50,3"	13h7'59,1"	
C ₅ H ₁₀ O ₂	2h31'57,5"	2h59'18,3"	1d7h34'9,7"	3'43,4"	3'43,4"	8'29,1"	24'29,7"	51'55,1"	8h3'9,1"	1d1h3'53,2"	
C ₆ H ₅ OCH ₃	2h6'23,4"	3h18'32,3"	1d10h11'3,2"	4'53,0"	4'53,0"	7'3,3"	27'29,6"	55'32,4"	13h15'47,4"	1d4h7'32,7"	
C ₆ H ₆	12'9,5"	46'42,1"	10h40'59,3"	1'56,2"	1'56,2"	3'54,2"	130,4"	23'58,1"	3h9'47,0"	9h38'56,4"	
CF ₄	2'24,4"	2'56,4"	10'16,6"	20,9"	20,9"	27,7"	47,8"	1'22,4"	3'51,7"	11'32,3"	2h17'11,9"
CH ₂ F ₂	1'40,4"	1'42,5"	9'16,2"	18,8"	18,8"	23,9"	34,7"	1'0,1"	2'52,8"	9'15,3"	1h14'44,5"
CH ₃ F	1'13,4"	1'41,1"	7'18,8"	16,4"	16,4"	21,8"	51,4"	53,7"	2'36,6"	7'37,9"	1h0'27,5"
CH ₄	47,0"	47,1"	3'29,3"	14,7"	14,7"	19,5"	27,6"	38,1"	1'12,0"	3'36,3"	9'11,7"
CHF ₃	27,4"	2'49,1"	12'54,0"	22,0"	22,0"	25,5"	57,4"	1'24,8"	4'22,6"	15'1,9"	1h40'25,8"
CO	38,2"	36,8"	2'1,3"	13,2"	13,2"	17,4"	18,7"	29,7"	1'0,5"	2'18,7"	6'27,2"
CO ₂	52,5"	53,6"	3'54,2"	14,5"	14,5"	17,7"	46,0"	37,0"	1'23,5"	4'39,1"	14'21,4"
F ₂	33,3"	32,8"	1'38,8"	13,8"	13,8"	15,6"	42,8"	26,8"	37,0"	1'43,4"	3'42,2"
H ₂	13,6"	13,9"	39,4"	10,9"	10,9"	11,5"	13,2"	37,9"	15,5"	25,0"	33,6"
H ₂ CO ₃	5'47,2"	5'57,7"	42'59,7"	24,7"	24,7"	37,4"	1'19,3"	2'48,4"	12'12,1"	42'58,1"	4h53'34,5"
H ₂ PO ₄ ⁻	12'58,8"	13'46,6"	2h40'56,1"	47,5"	47,5"	2'9,8"	3'21,2"	6'25,9"	27'25,9"	2h21'28,8"	11h40'39,3"
H ₂ SO ₄	13'8,6"	14'32,1"	2h41'54,3"	1'30,3"	1'30,3"	1'11,7"	3'15,8"	6'35,8"	27'25,7"	2h25'50,3"	11h54'19,9"
H ₃ PO ₄	23'39,6"	8'3,4"	3h28'50,1"	1'0,5"	1'0,5"	1'21,1"	3'56,8"	8'34,0"	35'54,2"	2h57'16,6"	15h24'16,6"

Continuação da tabela											
HCl	57,2"	34,9"	1'31,9"	13,2"	13,2"	13,9"	17,9"	31,1"	35,3"	1'29,4"	2'54,5"
HF	26,9"	26,4"	1'30,8"	26,9"	26,9"	16,4"	16,0"	25,2"	36,2"	1'27,4"	2'40,4"
HPO ⁻² ₄	10'52,3"	11'47,0"	1h9'16,1"	50,3"	50,3"	1'3,2"	2'39,4"	4'58,8"	232,7"	1h2'13,8"	11h3'59,8"
HSO ⁻ ₄	10'48,8"	11'22,0"	1h8'25,1"	40,3"	40,3"	1'23,9"	2'29,4"	5'18,3"	221,7"	1h5'36,7"	8h30'25,7"
LiH	15,6"	15,5"	1'3,9"	17,6"	17,6"	13,7"	16,4"	24,8"	30,0"	30,9"	47,9"
NaCl	1'8,2"	42,7"	2'26,7"	13,8"	13,8"	18,9"	21,8"	40,6"	59,3"	1'35,0"	3'10,8"
NaH	36,4"	31,6"	1'35,9"	14,4"	14,4"	34,7"	16,9"	26,8"	35,8"	1'17,0"	1'5,6"
O ₂	32,8"	32,1"	1'34,8"	13,5"	13,5"	16,6"	19,5"	24,9"	39,1"	1'52,2"	4'5,3"
O ₃	1'22,3"	59,0"	4'12,0"	15,1"	15,1"	38,6"	24,7"	39,3"	1'36,3"	5'9,8"	15'26,9"
PH ₃	1'33,3"	48,7"	2'42,7"	15,7"	15,7"	21,3"	22,9"	34,1"	1'5,7"	3'9,2"	10'50,5"
PO ⁻³ ₄	3'10,6"	2'51,4"	11'39,9"	24,2"	24,2"	28,2"	1'0,7"	2'8,5"	4'27,6"	12'17,1"	4h13'50,0"
SH ₂	1'6,7"	34,1"	1'54,1"	13,4"	13,4"	18,2"	19,6"	29,8"	1'5,9"	1'59,1"	4'59,6"
SiH ₄	1'11,8"	1'3,0"	3'2,5"	16,1"	16,1"	22,6"	25,0"	39,9"	1'21,4"	3'12,5"	9'57,1"
SiO ₂	59,2"	1'4,6"	4'39,0"	16,7"	16,7"	41,4"	26,7"	39,9"	1'33,6"	4'17,9"	14'35,7"
SO ₂	1'24,8"	1'43,4"	4'38,9"	16,8"	16,8"	34,5"	27,6"	44,7"	1'42,3"	4'56,6"	16'26,8"
SO ⁻² ₄	3'28,0"	2'37,5"	10'46,2"	24,5"	24,5"	39,7"	55,4"	1'30,5"	4'25,8"	12'36,4"	2h22'21,4"

Fonte: Do autor(2021)

Tabela 49: Tempo computacionais para cálculos tipo (*single point*) com o funcional PBE0

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2flg	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3	aug pc-3
BF ₄ ⁻	1'18,9"	2'24,0"	10'2,7"	22,4"	28,7"	24,8"	47,8"	1'18,9"	3'40,0"	11'13,5"	1h57'55,6"
BH ₄ ⁻	39,7"	47,3"	3'23,2"	17,1"	17,8"	17,2"	24,4"	39,7"	1'18,3"	3'29,0"	8'18,5"
CO ₃ ⁻²	1'8,0"	2'11,6"	11'17,0"	19,3"	23,8"	20,8"	38,0"	1'8,0"	3'37,3"	12'7,5"	2h34'4,3"
HCO ₃ ⁻	2'9,8"	4'32,4"	29'10,9"	23,8"	41,3"	27,5"	1'3,2"	2'9,8"	8'23,6"	30'31,7"	3h29'11,6"
NO ₂ ⁻	41,1"	59,9"	4'13,2"	17,9"	17,9"	16,8"	24,7"	41,1"	1'28,7"	4'46,0"	15'29,8"
NO ₃ ⁻	1'55,0"	3'2,1"	17'47,9"	21,9"	25,8"	23,1"	46,3"	1'55,0"	5'30,7"	20'32,9"	2h10'4,5"
OH ⁻	44,5"	30,6"	1'31,3"	14,2"	14,9"	15,5"	16,9"	44,5"	29,5"	1'23,3"	2'44,5"
AlF ₂ H	1'18,0"	1'36,5"	13'41,5"	53,3"	31,0"	25,5"	43,1"	1'18,0"	4'38,6"	11'32,9"	47'43,1"
AlF ₃	1'42,0"	1'45,3"	20'18,8"	27,0"	31,4"	28,6"	58,8"	1'42,0"	6'8,5"	18'10,5"	1h15'17,7"
AlFH ₂	59,6"	1'10,8"	8'50,2"	20,7"	23,7"	29,6"	34,5"	59,6"	2'34,6"	7'18,5"	27'20,6"
AlH ₃	1'13,6"	41,2"	5'32,0"	17,9"	18,6"	21,1"	25,8"	1'13,6"	1'36,8"	4'23,8"	14'50,3"
BF ₃	1'33,8"	3'0,1"	17'38,0"	19,1"	24,4"	24,7"	42,6"	1'33,8"	5'33,3"	19'6,4"	1h54'3,9"
BH ₃	32,8"	35,7"	2'35,1"	15,9"	15,2"	17,5"	18,0"	32,8"	46,7"	2'22,1"	6'2,2"
C ₂ H ₄ O ₂	4'37,6"	8'45,2"	2h0'54,1"	33,4"	44,3"	46,9"	2'0,1"	4'37,6"	19'53,4"	1h44'49,7"	9h17'8,7"
C ₃ H ₆ O ₂	10'49,9"	21'29,7"	5h35'44,4"	55,9"	1'24,2"	1'28,0"	4'47,0"	10'49,9"	1h24'31,8"	4h53'27,5"	1d15h49'54,5"
C ₄ H ₆	4'25,0"	7'58,4"	2h13'11,0"	34,7"	42,5"	45,4"	2'2,1"	4'25,0"	20'31,7"	1h55'27,6"	12h59'36,2"
C ₄ H ₈ O ₂	20'31,3"	1h133,1"	12h25'43,7"	1'30,0"	2'26,4"	2'37,0"	9'25,3"	20'31,3"	3h16'24,8"	10h35'2,4"	3d14h59'5,4"
C ₅ H ₁₀ O ₂	51'51,8"	3h29,4"	1d6h22'1,6"	4'1,9"	5'51,0"	5'54,0"	24'30,1"	51'51,8"	7h49'24,5"	23h417,9"	12d8h59'0,4"
C ₆ H ₅ OCH ₃	54'25,7"	4h13'28,7"	1d10h38'2,7"	3'56,4"	6'44,2"	6'25,9"	26'50,2"	54'25,7"	15h41'8,0"	1d5h0'14,0"	12d12h27'3,3"
C ₆ H ₆	7'14,1"	13'3,9"	4h45'49,3"	44,4"	1'2,9"	1'14,7"	3'28,0"	7'14,1"	1h13'5,3"	4h35'8,3"	1d2h48'19,5"
CF ₄	1'23,5"	2'26,3"	10'13,6"	23,4"	28,3"	28,2"	45,7"	1'23,5"	4'4,7"	11'7,5"	1h58'1,3"
CH ₂ F ₂	1'1,5"	1'42,3"	9'11,8"	19,4"	20,7"	23,1"	45,8"	1'1,5"	2'47,3"	9'7,3"	1h14'19,6"
CH ₃ F	54,9"	1'19,2"	7'15,4"	17,9"	18,7"	21,9"	28,3"	54,9"	2'18,8"	7'29,8"	59'8,8"
CH ₄	40,5"	47,5"	3'30,8"	16,5"	17,5"	19,4"	22,4"	40,5"	1'11,1"	3'13,5"	8'52,7"
CHF ₃	1'24,8"	2'32,6"	12'49,2"	21,3"	26,2"	26,7"	52,5"	1'24,8"	4'38,1"	13'35,9"	1h42'49,6"
CO	29,8"	36,3"	2'2,7"	14,5"	14,5"	17,6"	17,0"	29,8"	42,7"	2'18,0"	6'26,0"
CO ₂	37,9"	54,3"	3'53,7"	15,5"	17,2"	18,5"	20,7"	37,9"	1'20,2"	4'46,0"	14'17,3"
F ₂	28,9"	33,8"	1'38,3"	14,7"	14,7"	16,7"	15,7"	28,9"	34,5"	1'42,8"	3'43,0"
H ₂	15,4"	24,2"	38,9"	11,3"	10,9"	17,1"	11,3"	15,4"	15,2"	24,5"	34,5"
H ₂ CO ₃	2'49,3"	5'40,6"	42'42,2"	26,4"	33,3"	39,2"	1'34,5"	2'49,3"	11'45,9"	42'41,6"	4h51'27,3"
H ₂ PO ₄ ⁻	7'0,6"	23,2"	2h38'49,3"	1'4,1"	1'12,4"	1'8,6"	3'10,4"	7'0,6"	27'51,2"	2h19'0,3"	15h48'0,9"
H ₂ SO ₄	7'10,9"	13'42,6"	2h39'34,6"	50,1"	1'13,0"	1'26,6"	3'6,5"	7'10,9"	27'20,0"	2h21'55,5"	11h44'1,9"
H ₃ PO ₄	7'57,0"	24'15,5"	3h24'54,0"	1'9,0"	1'23,4"	1'19,9"	3'52,3"	7'57,0"	35'39,1"	2h51'29,5"	15h7'27,1"

Continuação da tabela											
HCl	40,0"	36,1"	1'31,3"	14,5"	14,8"	28,1"	16,3"	40,0"	33,7"	1'28,7"	2'54,3"
HF	44,8"	28,7"	1'30,8"	15,0"	13,9"	16,7"	14,6"	44,8"	28,3"	1'20,7"	2'39,9"
HPO ₄ ⁻²											
HSO ₄ ⁻	4'58,9"	133,5"	1h7'36,3"	41,2"	1'1,4"	57,3"	2'29,8"	4'58,9"	20'8,2"	1h3'22,5"	8h2'12,4"
LiH	26,6"	16,3"	1'4,9"	14,0"	15,3"	16,2"	15,7"	26,6"	43,8"	42,3"	46,4"
NaCl	1'1,7"	43,2"	2'27,0"	45,7"	17,6"	19,8"	37,0"	1'1,7"	57,0"	1'35,4"	3'18,8"
NaH	28,5"	32,2"	1'36,6"	26,9"	14,9"	19,0"	16,0"	28,5"	34,2"	35,5"	50,7"
O ₂	26,6"	32,9"	1'33,3"	15,0"	15,2"	17,7"	15,8"	26,6"	34,9"	1'43,6"	3'43,1"
O ₃	56,6"	1'18,2"	6'36,6"	16,4"	21,0"	19,9"	25,3"	56,6"	29,1"	7'40,2"	27'36,2"
PH ₃	35,5"	1'41,9"	2'40,2"	15,6"	17,6"	19,3"	20,7"	35,5"	1'16,3"	3'19,7"	10'59,8"
PO ₄ ⁻³	3'54,1"	13'54,1"	49'32,2"	38,2"	56,5"	46,7"	2'0,6"	3'54,1"	15'2,9"	46'45,3"	12h9'55,2"
SH ₂	32,8"	35,2"	1'52,8"	14,6"	15,1"	19,8"	25,2"	32,8"	42,5"	1'57,8"	4'37,6"
SiH ₄	1'5,7"	1'31,1"	7'35,9"	19,2"	22,4"	24,6"	35,9"	1'5,7"	2'48,1"	7'43,8"	29'45,6"
SiO ₂	48,4"	1'25,7"	6'45,3"	18,4"	21,0"	21,8"	27,0"	48,4"	2'10,8"	6'58,5"	25'48,0"
SO ₂	1'5,8"	1'7,6"	4'38,8"	18,9"	20,3"	21,5"	25,4"	1'5,8"	2'13,2"	5'11,5"	16'29,7"
SO ₄ ⁻²	1'41,4"	2'50,6"	10'43,7"	26,0"	32,8"	29,6"	1'34,2"	1'41,4"	98,9"	11'48,7"	2h25'13,5"

Fonte: Do autor(2021)

Tabela 50: Tempo computacionais para cálculos tipo (*single point*) com o método HF

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2flg	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3	aug pc-3
BF ₄ ⁻	1'30,4"	1'46,1"	9'32,3"	17,8"	50,0"	20,8"	30,3"	1'0,9"	3'3,0"	10'49,2"	2h40'3,4"
BH ₄ ⁻	32,1"	34,3"	2'42,2"	14,6"	16,5"	33,0"	19,3"	33,3"	48,4"	3'11,7"	8'22,4"
CO ₃ ⁻²	1'15,7"	2'1,2"	6'59,3"	16,3"	17,1"	20,1"	24,6"	48,2"	2'17,7"	8'57,6"	2h3'35,9"
HCO ₃ ⁻	3'14,0"	3'57,5"	31'14,8"	16,6"	19,1"	21,0"	46,9"	1'56,4"	8'21,3"	34'6,4"	4h17'48,0"
NO ₂ ⁻	47,9"	1'5,9"	4'14,8"	29,8"	15,4"	17,3"	20,5"	33,9"	1'30,8"	5'1,3"	17'4,2"
NO ₃ ⁻	1'36,1"	1'51,9"	7'0,2"	16,4"	17,0"	19,4"	28,9"	46,7"	2'16,4"	8'46,1"	1h21'35,0"
OH ⁻	26,1"	28,5"	1'34,4"	12,9"	12,6"	15,3"	16,2"	25,1"	32,3"	1'27,7"	2'56,2"
AlF ₂ H	1'46,5"	1'28,5"	8'39,2"	23,9"	32,8"	20,8"	25,1"	53,1"	2'45,6"	8'22,3"	33'3,3"
AlF ₃	1'47,1"	1'51,1"	8'39,2"	18,4"	39,7"	21,5"	27,8"	1'8,5"	2'58,4"	7'38,8"	1h11'54,7"
AlFH ₂	1'18,1"	1'5,0"	6'10,1"	16,5"	17,8"	20,0"	21,1"	39,1"	1'55,6"	6'11,2"	21'37,5"
AlH ₃	46,9"	38,2"	3'18,9"	14,4"	14,9"	18,0"	19,9"	28,6"	51,3"	2'36,8"	7'48,9"
BF ₃	1'11,8"	1'20,3"	6'48,7"	17,9"	18,4"	21,2"	25,0"	46,0"	2'24,6"	8'5,8"	1h10'54,1"
BH ₃	30,1"	31,3"	2'31,6"	15,1"	14,8"	17,9"	18,1"	28,9"	40,2"	2'19,1"	6'31,4"
C ₂ H ₄ O ₂	7'12,0"	8'57,9"	3h13'51,0"	18,0"	23,5"	27,1"	1'14,4"	3'50,1"	21'55,3"	2h48'46,4"	14h23'45,7"
C ₃ H ₆ O ₂	2'25,2"	26'26,6"	7h0'47,3"	24,5"	36,7"	41,9"	2'59,7"	11'6,3"	2h6'24,1"	7h53'36,2"	1d23h10'9,3"
C ₄ H ₆	11'44,9"	13'25,0"	4h21'13,0"	19,5"	25,8"	31,0"	2'21,5"	5'54,7"	38'23,6"	3h43'15,2"	1d6h59'58,4"
C ₄ H ₈ O ₂	43'52,9"	52'18,4"	21h25'35,8"	35,9"	1'2,3"	1'10,9"	8'13,9"	21'30,8"	4h52'15,6"	17h10'10,8"	
C ₅ H ₁₀ O ₂	2h17'57,2"	3h119,3"	1d15h9'42,2"	53,9"	2'22,1"	1'55,6"	13'11,2"	39'43,8"	9h20'3,7"	1d4h58'9,2"	
C ₆ H ₅ OCH ₃	2h520,8"	4h32'24,8"	2d6h1'54,4"	1'3,8"	2'10,9"	2'18,5"	14'45,3"	45'27,7"	10h49'55,8"	1d10h55'29,5"	
C ₆ H ₆	33'9,4"	38'5,9"	13h37'51,4"	32,8"	52,7"	1'0,4"	5'0,7"	16'35,7"	3h15'3,6"	11h41'44,9"	3d5h36'23,0"
CF ₄	1'48,0"	2'7,3"	9'28,7"	17,9"	19,8"	20,0"	32,1"	1'0,1"	3'49,0"	11'22,4"	2h31'32,2"
CH ₂ F ₂	2'0,4"	1'19,6"	8'58,6"	15,9"	15,4"	18,8"	21,9"	47,1"	2'23,4"	9'19,2"	1h28'49,0"
CH ₃ F	56,9"	1'10,6"	7'1,0"	15,1"	14,9"	17,8"	20,6"	39,6"	1'56,8"	7'19,7"	1h13'4,1"
CH ₄	36,0"	32,2"	2'47,7"	16,3"	15,1"	18,1"	17,4"	29,4"	50,7"	2'40,3"	8'12,8"
CHF ₃	1'48,1"	2'31,1"	13'14,5"	16,2"	19,0"	20,7"	29,3"	1'13,3"	3'46,6"	14'45,4"	2h16'48,3"
CO	34,5"	33,4"	2'10,5"	15,5"	14,8"	17,1"	16,2"	30,2"	45,5"	2'25,3"	6'55,8"
CO ₂	46,5"	47,2"	3'58,7"	15,3"	15,5"	17,8"	19,4"	46,0"	1'17,2"	4'31,4"	16'1,6"
F ₂	30,9"	30,6"	1'41,4"	14,8"	15,2"	17,1"	26,3"	27,1"	37,3"	1'46,8"	3'60,0"
H ₂	16,9"	12,4"	0'41,1"	10,8"	12,3"	13,4"	12,2"	14,9"	20,0"	24,1"	35,6"
H ₂ CO ₃	4'19,3"	5'9,8"	46'58,6"	18,2"	18,4"	34,2"	52,0"	2'23,6"	11'39,6"	49'22,8"	6h34'12,8"
H ₂ PO ₄ ⁻	11'59,7"	11'46,0"	3h16'49,8"	23,0"	33,0"	33,6"	1'50,8"	5'1,6"	25'5,4"	2h52'59,8"	14h43'51,1"
H ₂ SO ₄	12'18,3"	11'27,8"	3h22'27,3"	23,0"	33,0"	34,0"	1'41,7"	4'50,9"	25'43,5"	3h2'15,9"	15h5'14,8"
H ₃ PO ₄	16'17,3"	6'58,7"	4h29'13,4"	23,7"	36,2"	37,4"	2'2,2"	6'7,4"	33'17,8"	3h46'33,6"	20h17'14,6"

Continuação da tabela											
HCl	35,5"	34,8"	1'34,5"	14,3"	16,2"	20,3"	15,9"	29,6"	36,0"	1'31,9"	3'17,0"
HF	30,3"	28,1"	1'34,3"	13,7"	14,0"	16,4"	15,3"	26,3"	31,2"	1'24,6"	2'55,0"
HPO ⁻² ₄	9'23,7"	8'49,0"	1h11'54,7"	26,6"	30,4"	30,6"	1'23,2"	3'33,2"	18'57,0"	1h8'0,9"	11h29'2,8"
HSO ⁻ ₄	14,4"	8'58,2"	1h11'18,2"	21,6"	32,7"	31,4"	1'22,9"	3'38,3"	19'4,4"	1h10'42,9"	11h9'30,9"
LiH	15,5"	13,6"	1'11,3"	14,1"	14,1"	17,5"	15,4"	24,9"	31,7"	30,0"	47,1"
NaCl	1'33,8"	40,5"	2'39,6"	14,8"	16,8"	19,9"	20,5"	41,6"	1'0,5"	1'39,1"	3'28,5"
NaH	53,3"	30,2"	1'42,6"	13,8"	14,2"	17,5"	16,4"	29,0"	38,0"	34,4"	53,5"
O ₂	29,6"	28,5"	1'38,0"	14,5"	15,6"	17,3"	18,2"	26,4"	37,1"	1'44,8"	4'14,6"
O ₃	1'0,8"	48,9"	4'11,4"	15,0"	15,4"	21,3"	20,1"	48,0"	1'30,8"	4'53,5"	17'8,6"
PH ₃	46,8"	37,5"	2'26,6"	16,0"	13,8"	17,8"	20,7"	28,7"	52,9"	3'5,8"	11'11,5"
PO ⁻³ ₄	2'25,6"	2'7,9"	10'21,9"	21,0"	22,1"	21,4"	33,3"	1'13,7"	3'46,9"	11'47,7"	4h10'21,3"
SH ₂	37,0"	29,9"	1'51,7"	14,4"	18,3"	18,5"	17,0"	30,2"	1'12,4"	1'57,1"	4'46,0"
SiH ₄	47,7"	36,1"	3'0,8"	14,0"	15,0"	18,5"	19,3"	30,2"	1'0,6"	3'6,8"	10'50,9"
SiO ₂	1'11,1"	55,1"	4'27,3"	17,8"	18,0"	23,0"	23,6"	38,2"	1'38,8"	5'0,8"	16'2,3"
SO ₂	1'16,9"	58,8"	4'43,6"	17,2"	17,9"	20,3"	22,9"	38,5"	1'42,9"	5'16,8"	17'42,9"
SO ⁻² ₄	2'55,0"	1'55,2"	10'39,0"	20,9"	22,3"	21,9"	32,9"	1'10,2"	3'28,9"	11'28,3"	2h55'51,5"

Fonte: Do autor(2021)

Tabela 51: Tempo computacionais para cálculos tipo (*single point*) com o método MP2

Molécula	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	6-311G	6-311G+	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3
BF ₄ ⁻	1h15'7,7"	1h15'27,6"	7h59'21,4"	3'49,4"	7'4,0"	5'1,9"	14'44,9"	35'56,7"	3h2'56,9"	11h50'31,3"
BH ₄ ⁻	5'32,4"	6'15,8"	57'59,8"	57,5"	56,8"	1'10,1"	1'39,6"	4'38,0"	14'44,0"	54'46,4"
CO ₃ ⁻²	27'27,0"	55'28,7"	3h49'26,0"	2'10,9"	3'57,1"	2'40,6"	7'45,4"	17'41,3"	1h17'47,8"	4h49'37,7"
HCO ₃ ⁻	537,1"	49'41,0"	8h33'54,4"	2'24,2"	5'43,1"	3'13,9"	10'47,6"	31'37,9"	2h23'47,8"	11h27'58,6"
NO ₂ ⁻	13'11,2"	12'24,1"	1h7'41,2"	2'8,1"	1'50,8"	1'42,3"	3'31,2"	7'55,0"	22'28,1"	
NO ₃ ⁻	29'39,2"	34'23,8"	3h27'29,5"	2'48,4"	3'52,0"	2'37,7"	7'15,4"	18'8,4"	1h5'35,6"	
OH ⁻	2'29,7"	2'36,5"	11'54,2"	52,0"	53,5"	58,8"	1'5,6"	2'12,8"	4'7,4"	14'20,7"
AlF ₂ H	36,5"	10'40,3"	2h55'10,4"	1'41,2"	2'28,9"	3'32,2"	5'35,5"	12'38,0"	44'37,3"	3h14'5,2"
AlF ₃	52'57,3"	22'18,4"	4h5'12,2"	2'52,5"	5'13,0"	3'44,4"	9'8,7"	21'27,8"	1h22'35,1"	5h32'15,0"
AlFH ₂	18'33,6"	5'31,8"	1h35'34,4"	1'26,0"	1'36,8"	3'41,7"	3'32,2"	8'25,2"	23'54,5"	
AlH ₃	15,9"	2'14,8"	54'22,6"	56,5"	1'10,5"	1'20,7"	1'53,6"	4'24,5"	12'53,9"	54'26,8"
BF ₃	27'58,7"	34'15,0"	3h44'5,9"	2'7,4"	3'44,9"	3'45,2"	7'1,4"	19'4,4"	1h2'56,9"	4h58'42,7"
BH ₃	4'25,4"	4'25,4"	42'49,2"	56,2"	56,2"	1'14,3"	1'23,3"	3'22,6"	9'34,6"	41'25,2"
C ₂ H ₄ O ₂	2h12'1,1"	2h20'18,6"	1d8h52'28,9"	3'38,4"	6'0,2"	6'10,9"	24'7,2"	1h1'14,6"	7h44'13,1"	1d12h53'11,0"
C ₃ H ₆ O ₂	8h26'56,2"	8h36'10,3"		8'34,4"	15'55,0"	13'20,3"	1h9'30,4"	4h1'33,7"	7h44'0,0"	
C ₄ H ₆	3h34'28,0"	3h42'37,6"	2d11h23'59,7"	4'39,5"	7'3,4"	8'54,9"	29'46,3"	1h45'0,5"	13h11'45,6"	2d15h44'11,0"
C ₄ H ₈ O ₂	19h2'6,9"	19h25'21,1"		15'49,1"	24'34,8"	23'48,6"	2h30'19,2"	9h33'48,1"	13h11'0,0"	
C ₃ H ₁₀ O ₂										
C ₆ H ₅ OCH ₃										
C ₆ H ₆	10h21'24,6"	10h23'35,1"		11'36,9"	19'20,3"	16'42,0"	1h28'57,5"	5h27'20,3"	1d8h33'4,0"	
CF ₄	1h148,3"	1h29'38,3"	8h19'11,9"	3'49,0"	6'59,9"	4'16,2"	14'48,9"	34'36,4"	3h17'36,6"	12h20'53,5"
CH ₂ F ₂	23'1,7"	28'47,4"	3h10'17,1"	1'31,8"	2'23,9"	2'5,1"	5'53,9"	15'27,6"	1h3'13,7"	3h55'43,1"
CH ₃ F	14'33,0"	17'43,9"	2h38'25,0"	1'7,6"	1'15,6"	1'27,9"	3'31,9"	9'55,3"	35'32,4"	2h48'2,5"
CH ₄	6'34,1"	7'23,1"	1h1'57,2"	59,5"	57,2"	1'11,6"	1'54,8"	4'4,6"	14'46,5"	58'20,6"
CHF ₃	42'23,2"	55'48,5"	6h24'8,5"	2'19,6"	4'40,6"	4'4,6"	9'51,1"	24'6,6"	2h20'15,0"	9h28'38,6"
CO	4'44,5"	4'47,1"	24'25,2"	53,3"	57,8"	1'7,4"	1'27,6"	3'35,0"	9'19,7"	
CO ₂	12'0,0"	11'53,3"	1h2'40,8"	1'11,1"	1'37,3"	1'29,2"	3'18,9"	7'29,5"	21'10,9"	
F ₂	4'1,9"	4'24,3"	18'3,9"	54,8"	1'1,9"	1'25,2"	1'35,3"	3'34,8"	7'37,4"	
H ₂	57,7"	1'0,5"	4'7,6"	34,8"	36,1"	41,7"	43,8"	58,9"	1'7,0"	
H ₂ CO ₃	1h6'47,9"	1h44'47,5"	13h24'47,8"	2'41,7"	6'39,3"	3'42,2"	13'7,4"	36'52,8"	3h43'1,2"	16h58'41,5"
H ₂ PO ₄ ⁻	5h31'35,9"	7h25'0,8"	1d15h39'56,0"	6'55,0"	12'22,1"	9'18,3"	32'20,2"	1h58,4"	11h51'46,3"	
H ₂ SO ₄	5h27'7,4"	5h33'15,8"	1d16h16'21,5"	7'36,9"	11'29,5"	8'50,9"	36'25,0"	1h56'46,1"	11h48'38,3"	
H ₃ PO ₄	6h44'34,0"	10h38'12,5"	16h16'0,0"	8'26,1"	13'39,3"	133,5"	43'18,7"	2h45'25,0"	15h17'40,4"	

Continuação da tabela										
HCl	5'26,2"	12'26,6"	15'39,5"	49,5"	55,9"	1'6,5"	1'15,3"	2'52,0"	5'15,7"	
HF	2'16,9"	12'38,7"	12'36,3"	47,2"	55,1"	1'1,4"	1'0,8"	2'14,7"		
HPO ₄ ⁻²	4h8'11,3"	7h49'51,0"	1d3h14'50,1"	6'19,1"	13'21,5"	8'44,1"	27'55,9"	1h25'7,9"	8h20'25,0"	
HSO ₄ ⁻	4h20'33,1"	3h26'9,6"	1d3h3'29,8"	7'27,6"	11'12,7"	9'44,4"	28'54,5"	1h26'17,7"	8h5'41,9"	
LiH	1'2,2"	3'3,0"	6'18,0"	50,3"	48,2"	1'11,8"	1'5,1"	2'4,9"	2'59,4"	2'54,9"
NaCl	18'49,5"	7'55,0"	6'0,0"	1'41,3"	1'47,5"	1'38,6"	2'20,4"	5'45,5"	13'44,1"	21'39,8"
NaH	4'9,6"	3'2,5"	12'26,0"	48,6"	52,1"	1'7,2"	1'14,4"	3'9,3"	4'13,8"	4'17,8"
O ₂	3'52,7"	3'59,6"	16'57,1"	52,7"	57,2"	1'3,2"	1'32,0"	3'25,7"	6'56,4"	29'38,6"
O ₃	11'55,7"	14'22,8"	1h5'36,2"	1'12,1"	2'20,7"	1'28,9"	3'33,4"	8'43,0"	26'59,2"	1h27'47,9"
PH ₃	10'21,3"	2'17,5"	46'14,8"	54,1"	1'29,0"	1'16,7"	2'27,7"	5'46,2"	13'45,3"	1h1'4,2"
PO ₄ ⁻³	2h21'51,6"	46'51,1"	9h25'22,6"	5'20,3"	9'26,8"	6'41,0"	20'57,5"	52,2"	4h6'8,6"	13h17'21,3"
SH ₂	6'28,0"	5'19,0"	20'0,4"	52,4"	55,4"	1'15,8"	1'27,6"	3'46,2"	7'49,0"	29'34,5"
SiH ₄	13'33,0"	8'6,1"	1h5'43,1"	55,8"	1'2,3"	1'21,3"	2'18,0"	6'9,3"	19'7,9"	1h18'27,0"
SiO ₂	22'20,5"	15'59,8"	1h30'32,8"	1'44,8"	2'23,9"	1'57,1"	4'24,3"	9'45,6"	30'26,6"	1h27'20,9"
SO ₂	24'24,3"	16'3,0"	1h27'4,4"	2'32,3"	2'44,1"	1'59,3"	5'32,0"	43'23,4"	30'31,2"	1h39'18,0"
SO ₄ ⁻²	2h21'21,8"	1h34'33,5"	9h24'40,1"	6'34,3"	8'12,9"	6'45,9"	21'36,8"	43'23,4"	3h46'14,5"	13h46'29,2"

Fonte: Do autor(2021)

5 CONCLUSÃO

O Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock Polinomial, pMCG-HF, é conhecida por gerar conjuntos de base com expoente naturalmente mais difusos devido à discretização polinomial adotada para descrever as malhas responsáveis pela escolha das funções que irão compor o conjunto de base, e iniciar o processo de confecção desses conjuntos partindo do átomo aniônico, contribuiu para a seleção de funções ainda mais difusas que o habitual. Para testar o desempenho desse conjunto de base ainda mais difuso (aMCG) para descrever propriedades como energia total, momento dipolo e polarizabilidade, foram selecionados os átomos H, Li, B, C, N, O, F, Na, Al, Si, P, S e Cl.

Determinar a malha utilizada é primeira etapa para a geração de um conjunto de base aplicando o pMCG-HF, onde recomenda-se de 3 a 5 incrementos. Após vários testes, para determinar qual seria a melhor quantidade de incrementos, conjuntos de base como referência, de qual átomo deveria ser esse conjunto, no caso, igual ao átomo analisado (porém, com a quantidade de elétrons menor), isoeletrônico (o átomo subsequente do mesmo período) ou um átomo maior (átomo subsequente de uma mesma família), observou que os melhores resultados vinham de malhas com 3 incrementos, do conjunto de base pc-4 considerando para os átomos H-F e Na o átomo seguinte da mesma família e para Al-Cl o átomo isoeletrônico.

Seguindo o estudo, foi iniciado a determinação da quantidade de expoentes necessários para descrever precisamente os átomos selecionados. Para isso, os expoentes foram adicionados um a um em cada um dos orbitais atômicos e o valor de energia obtido era comparado ao obtido pelo método Hartree-Fock Numérico (NHF) determinado por Koga *et. al.* A limitação no número de expoentes foi dada pelo próprio programa utilizado para prevê-los que não ultrapassa o valor de 30 expoentes por orbital. Em alguns casos, como Cl^- recomenda-se nova análise de expoentes e considerar a modificação do programa para aumentar o limite máximo de funções. Apesar das limitações, os conjuntos de primitivas foram gerados com sucesso.

Para a etapa de contração foi utilizado o método da contração geral, por ser um método mais simples e eficiente de diminuir a quantidade de funções utilizadas por meio de uma combinação linear entre os expoentes do conjuntos de primitivas mantendo ou com pequenas perdas de energia. Entretanto, essa foi certamente a fase mais delicada de todo o processo, uma vez que alguns problemas de convergências surgiram que impediram a realização do cálculo ou ainda problemas numéricos, onde o conjunto de base contraído tinha energia superior ao conjunto de primitivas. Para ultrapassar esse gargalo, foi necessário um estudo minucioso de seleção do conjunto de primitiva utilizado nesta etapa, sendo necessário a seleção de outros conjuntos de primitiva, além de uma análise rigorosa de

quais expoentes deveriam ser eliminados durante o processo, em alguns casos, essa situação foi apenas amenizada e não completamente resolvida.

A polarização do conjunto de base contraído é importantíssima para a descrição de propriedades relacionadas à região de valência e é caracterizada como a adição de funções com momento angular maior do que os já presentes no átomo estudado aumentando a descrição da região mais distante do núcleo. Para isso, é praxe realizar dois estudos para determinar tais funções, pelo método da polarização pinçada, onde escolhem-se expoentes de dentro do conjunto de base para compor as funções de polarização e a polarização otimizada que re-otimiza os expoentes selecionados para polarização. Entretanto, neste trabalho, não foi possível utilizar o método da polarização otimizada, pois os expoentes selecionados eram tão difusos que o cálculo apresentava problemas para alcançar a convergência e portanto, os resultados apresentados foram apenas para o método de polarização pinçada. Dessa forma, foram selecionadas duas polarizações, uma comumente utilizada pelo grupo de pesquisa "2d1f" e uma mais extrema "3d2f1g".

Após a superação dos obstáculos encontrados, dois conjuntos de base, aMCG (2d1f e 3d2f1g), foram obtidos e posteriormente testados para um grande conjunto de moléculas (polares e apolares, neutras ou iônicas e quantidade de ligações variadas) com vários métodos diferentes (DFTs, HF e MP2) e para comparação foram selecionados conjuntos de base já conhecidos na literatura contendo ou não funções de polarização extras, normalmente chamados de conjuntos de base aumentados ("aug").

Julgou-se necessário avaliar se as geometrias obtidas através dos cálculos computacionais seriam confiáveis e, para isso, foram comparados resultados obtidos por cálculos de otimização de geometria para cada conjunto de base aMCG (2d1f e 3d2f1g) com todos métodos selecionados para o estudo (BLYP, B3LYP, BHHLYP, PBE0, HF e MP2) e então, os cálculos foram refeitos usando um maior grid (*integral=ultrafine*) utilizando o funcional B3LYP, pois mostrou ser o mais eficiente entre eles para calcular as geometrias selecionadas. Ao comparar a performance de otimização de geometria (B3LYP + "*integral=ultrafine*") entre os conjuntos de base selecionados com os resultados experimentais, observa-se que o menor erro médio tanto para comprimento quanto para ângulo de ligação foi obtido pelo conjunto de base aMCG-2d1f, apesar de não haver grande discrepâncias entre os resultados.

A propriedade energia total molecular (soma da energia cinética, potencial e de repulsão entre os elétrons), foi obtida por meio de cálculos *single point* das geometrias calculadas pelo conjunto de base aMCG-2d1f para cada método selecionado e nesse teste destacou-se o conjunto de base MCG que aplica o pMCG-HF à átomos neutros para gerar conjuntos de base.

As propriedades momento dipolo e polarizabilidade, a despeito de alguns resultados controversos, foram descritas satisfatoriamente pelos conjuntos de base gerados neste

trabalho (aMCG), com um desempenho comparável aos outros conjuntos de base já estabelecidos na literatura e ainda aos resultados experimentais. O conjunto de base aMCG-3d2f1g, apesar de se destacar dentre os outros por obter excelentes resultados para a propriedade de polarizabilidade, apresentou um alto custo computacional para obter tais resultados, compensando o uso do conjunto de base aug-cc-pVTZ, que obteve resultados semelhantes com um tempo computacional mais amigável.

Propõe-se uma revisão no programa utilizado para a geração do expoentes para aumentar o limite de funções por orbitais, esse ajuste pode fazer com que os expoentes selecionados apresentem menos problemas de convergência na fase de contração. Seria igualmente interessante estudar outras quantidades de funções de polarização, pois a quantidade 3d2f1g por mais que tenha sido crucial para uma melhor descrição da propriedade de polarizabilidade, exigiu um grande tempo computacional.

Do mesmo modo, recomenda-se ainda a realização de testes moleculares utilizando os métodos robustos CISD e CCSD(T), utilizar o conjunto de base de Sadlej para cálculos de polarizabilidade, uma vez que esse é conhecido por ser desenvolvido especialmente para descrever a polarizabilidade e ainda selecionar moléculas catiônicas para analisar o impacto desse conjunto de base mais difusos em um sistema carregado positivamente.

Finalmente, após vários testes moleculares, foi constatado que a nova metodologia proposta, o método da coordenada geradora considerando o átomo em ambiente aniônico, contribuiu para a geração de um conjunto de base naturalmente mais difuso, cujos resultados obtidos acompanharam as tendências observadas para os conjuntos de bases ditos aumentados presentes na literatura, a saber: aug-cc-pVTZ e aug-pc-3. Desta forma, é seguro afirmar que essa metodologia poderá ser implementada para a geração de conjuntos de base naturalmente "aumentados" para outros átomos da tabela periódica.

REFERÊNCIAS

- 1 PAULING L.; WILSON JR, E. B. W. **INTRODUCTION With Applications to Chemistry**. New York: McGraw-Hill Book Company, INC., 1935. 474 p.
- 2 MORTIMER, R. G. **Physical Chemistry**. 3. ed. San Diego: Elsevier Inc., 2008. 199–205 p.
- 3 LEVINE, I. N. **Quantum Chemistry**. 5. ed. New Jersey: Prentice Hall, Inc., 2000. 751 p.
- 4 MCQUARRIE, D. A. **Quantum Chemistry**. 2. ed. Sausalito: University Science Books, 1978. 1–704 p.
- 5 EISBERG, R. M. **Fundamentals of Modern Physics**. 3. ed. New York: John Wiley and Sons, Inc., 1963. 743 p.
- 6 ROTHHAAN, C. C. New developments in molecular orbital theory. **Reviews of Modern Physics**, College Park, v. 23, n. 2, p. 69–89, 1951.
- 7 CAMILETTI, G. G. **Conjuntos de Bases Gaussianas Correlacionados não Relativístico e Relativístico: Aplicação em Cálculos de Constantes Espectroscópicas e de Propriedades Elétricas e Magnéticas Moleculares: aplicação em cálculos de constantes espectroscópicas e de propriedades elétricas e magnéticas moleculares**. 2009. 121 f. Tese (Tese de Doutorado) — Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2009.
- 8 GUIMARÃES, A. R. **Funções de Base Gaussianas Geradas pelo Método da Coordenada Geradora Aplicadas em Cálculos Quânticos Moleculares**. 2018. 121 f. Tese (Tese de doutorado) — Instituto de Química de São Carlos, Universidade São Paulo, São Carlos, 2018.
- 9 DUNNING, T. H.; HAY, P. J. Gaussian Basis Sets for Molecular Calculations. In: **Methods of Electronic Structure Theory**. First edit. New York: Springer Science and Business Media, 2002. v. 136, p. 1–27.
- 10 JENSEN, F. Unifying general and segmented contracted basis sets. segmented polarization consistent basis sets. **Journal of Chemical Theory and Computation**, Washington, v. 10, p. 1074–1085, 2014.
- 11 RAFFENETTI, R. C. General contraction of Gaussian atomic orbitals: Core, valence, polarization, and diffuse basis sets; Molecular integral evaluation. **The Journal of Chemical Physics**, Melville, v. 4452, p. 4452–4458, 1973.
- 12 MARINGOLO, M. P.; TELLO, A. C. M.; GUIMARÃES, A. R.; ALVES, J. M. A.; LIMA, F. das C. A.; LONGO, E.; DA SILVA, A. B. F. On polarization functions for Gaussian basis sets. **Journal of Molecular Modeling**, Journal of Molecular Modeling, New York, v. 26, n. 10, p. 293, 2020.
- 13 GRIFFIN, J. J.; WHEELER, J. A. Collective motions in nuclei by the method of generator coordinates. **Physical Review**, College Park, v. 108, n. 2, p. 311–327, 1957.

- 14 HILL, D. L.; WHEELER, J. A. Nuclear constitution and the interpretation of fission phenomena. **Physical Review**, College Park, v. 89, n. 5, p. 1102–1145, 1953.
- 15 MOHALLEM, J. R.; DREIZLER, R. M.; TRSIC, M. A Griffin-Hill-Wheeler version of Hartree-Fock equation. **International Journal of Quantum Chemistry**, Hoboken, v. 20, p. 45–55, 1986.
- 16 MOHALLEM, J. R. A Futher Study of discratisation of the Griffin-Hill-Wheeler Equation. **Zeitschrift für Physik D** — atoms, molecules and clusters, New York, v. 3, p. 339–344, 1986.
- 17 JORGE, F. E. A segmented contraction methodology for Gaussian basis sets to be used in Dirac-Fock atomic and molecular calculations. **Chemical Physics Letters**, Amsterdam, v. 289, p. 469–472, 1998.
- 18 JORGE, F. E.; FANTIN, P. A. A universal basis set for cations and anions generated with the generator coordinate Hartree-Fock method. **Chemical Physics**, Amsterdam, v. 249, p. 105–111, 1999.
- 19 BARBOSA, R. C.; DA SILVA, A. B. F. A new proposal for the discretization of the Griffin—Wheeler—Hartree—Fock equations. **Molecular Physics**, Abingdon, v. 101, n. 8, p. 1073–1077, 2003.
- 20 CELESTE, R.; MARINGOLO, M. P.; COMAR, 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. **Journal of Molecular Modeling**, New York, v. 21, p. 1–7, 2015.
- 21 DAVIDSON, E. R. Basis Set Selection for Molecular Calculations. **Chemical Reviews**, Washington, v. 86, p. 681–96, 1988.
- 22 SILVER, D. M.; WILSON, S. Universal basis sets for electronic structure calculations. **The Journal of Chemical Physics**, Melville, v. 69, n. 8, p. 3787–3789, 1978.
- 23 SILVER, D. M.; NIEUWPOORT, W. C. Universal atomic basis sets. **Chemical Physics Letters**, Amsterdam, v. 57, n. 3, p. 421–422, 1978.
- 24 SILVER, D. M.; WILSON, S.; NIEUWPOORT, W. C. Universal basis sets and transferability of integrals. **International Journal of Quantum Chemistry**, Hoboken, v. 14, n. 5, p. 635–639, 1978.
- 25 JORGE, F. E.; DE CASTRO, E. V.; DA SILVA, A. B. A universal Gaussian basis set for atoms cerium through Lawrencium generated with the generator coordinate Hartree-Fock method. **Journal of Computational Chemistry**, Hoboken, v. 18, n. 13, p. 1565–1569, 1997.
- 26 JORGE F. E.; DE CASTRO, E. V. Improved generator coordinate Hartree-Fock method: Application to first-row atoms. **Chemical Physics Letters**, Amsterdam, v. 302, n. 5-6, p. 454–460, 1999.
- 27 GIORDAN, M.; CUSTODIO, R.; MORGON, N. H. A universal basis set to be used along with pseudopotentials. **Chemical Physics Letters**, Amsterdam, v. 279, n. 5-6, p. 396–402, 1997.

-
- 28 MALLI, G. L.; DA SILVA, A. B.; ISHIKAWA, Y. Universal Gaussian basis set for accurate ab initio relativistic Dirac-Fock calculations. **Physical Review A**, College Park, v. 47, n. 1, p. 143–146, 1993.
- 29 PARTRIDGE, H. Near Hartree-Fock quality GTO basis sets for the second-row atoms. **The Journal of Chemical Physics**, Melville, v. 90, n. 11, p. 1043–1047, 1989.
- 30 PARTRIDGE, H.; FAEGRI, K. High-quality Gaussian basis sets for fourth-row atoms. **Theoretica Chimica Acta**, Berlin, v. 82, n. 3-4, p. 207–212, 1992.
- 31 DITCHFIELD, R.; HEHRE, W. J.; POPLE, J. A. Self-consistent molecular-orbital methods. IX. An extended gaussian-type basis for molecular-orbital studies of organic molecules. **The Journal of Chemical Physics**, Melville, v. 54, n. 2, p. 720–723, 1971.
- 32 DILL, J. D.; POPLE, J. A. Self-consistent molecular orbital methods. XV. Extended Gaussian-type basis sets for lithium, beryllium, and boron. **The Journal of Chemical Physics**, Melville, v. 62, n. 7, p. 2921–2923, 1975.
- 33 BINKLEY, J. S.; POPLE, J. A. Self-consistent molecular orbital methods. XIX. Split-valence Gaussian-type basis sets for beryllium. **The Journal of Chemical Physics**, Melville, v. 66, n. 2, p. 879–880, 1977.
- 34 HEHRE, W. J.; POPLE, J. A. Self-consistent molecular orbital methods. XIII. An extended gaussian-type basis for boron. **The Journal of Chemical Physics**, Melville, v. 56, n. 8, p. 4229–4231, 1972.
- 35 DUNNING, T. H. Gaussian basis functions for use in molecular calculations. I. Contraction of (9s5p) atomic basis sets for the first-row atoms. **The Journal of Chemical Physics**, Melville, v. 53, n. 7, p. 2823–2833, 1970.
- 36 DUNNING, T. H. Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations. I. The atoms boron through neon and hydrogen. **Journal of Chemical Physics**, Melville, v. 110, n. 16, p. 7667–7676, 1989.
- 37 JENSEN, F. Polarization consistent basis sets : Principles. **Journal of Chemical Physics**, Melville, v. 115, n. 20, p. 9113–9125, 2001.
- 38 FROESE, C. Numerical Solution of the Hartree-Fock Equations. **Canadian Journal of Physics**, Ottawa, v. 41, p. 745–762, 1967.
- 39 KOGA, T.; TATEWAKI, H.; THAKKAR, A. J. Numerical Hartree–Fock energies of singly charged cations and anions with Numerical Hartree–Fock energies of singly charged cations and anions with $N \leq 54$. **The Journal of Chemical Physics**, Melville, v. 100, n. 11, p. 8140–8144, 1994.
- 40 SZABO, A.; OSTLUND, N. S. **Modern Quantum Chemistry::** Introduction to advanced electronic structure theory. Mineola: Dover Publications, Inc., 1996.
- 41 TRUHLAR, D. G.; MCKOY, V. Computational chemistry. **Computing in Science and Engineering**, New York, v. 2, n. 6, p. 19–21, 2000.
- 42 MORGON, N. H.; CUSTODIO, R. Teoria do Funcional de Densidade. **Química Nova**, São Paulo, v. 18, n. 1, p. 44–55, 1995.

- 43 MARQUES, M. A. L.; BOTTI, S. O que é e para serve a teoria dos funcionais da densidade? **Gazeta da Física**, Lisboa, v. 29, n. 4, p. 10–15, 2006.
- 44 KOHN, W.; SHAM, L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. **Physical Review**, College Park, v. 140, n. 4A, p. 1132–1138, 1965.
- 45 JENSEN, F. **Introduction to computational chemistry**. 2. ed. Chichester: John Wiley and Sons, Ltd, 2007. 1–620 p.
- 46 LEE, C.; YANG, W.; PARR, R. G. Development of the Colle-Salvetti correlation energy formula into a functional of the electron density. **Physical Review B**, College Park, v. 37, n. 2, p. 785–789, 1988.
- 47 BECKE, A. D. Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior. **Physical Review A**, College Park, v. 38, n. 6, p. 3098–3100, 1988.
- 48 JENSEN, F. Describing Anions by Density Functional Theory : Fractional Electron Affinity. Washington, v. 6, p. 2726–2735, 2010.
- 49 BECKE, A. D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. **The Journal of Chemical Physics**, Melville, v. 98, n. 7, p. 5648–5652, 1993.
- 50 STEPHENS, P. J.; DEVLIN, F. J.; CHABALOWSKI, C. F.; FRISCH, M. J. Ab Initio calculation of vibrational absorption and circular dichroism spectra using density functional force fields. **Journal of Physical Chemistry**, Washington, v. 98, n. 45, p. 11623–11627, 1994.
- 51 BECKE, A. D. A new mixing of Hartree-Fock and local density-functional theories. **The Journal of Chemical Physics**, Melville, v. 98, n. 2, p. 1372–1377, 1993.
- 52 PERDEW, J. P.; ZUNGER, A. Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems. **Physical Review B**, College Park, v. 23, n. 10, p. 5048–5079, 1981.
- 53 PERDEW, J. P. Density-functional approximation for the correlation energy of the inhomogeneous electron gas. **Physical Review B**, College Park, v. 33, n. 12, p. 8822–8824, 1986.
- 54 FRISCH, M. J.; TRUCKS, G. W.; SCHLEGEL, H. B.; SCUSERIA, G. E.; ROBB, M. A.; CHEESEMAN, J. R.; SCALMANI, G.; BARONE, V.; PETERSSON, G. A.; NAKATSUJI, H.; LI, X.; CARICATO, M.; BLOINO, J.; GOMPERTS, R.; MENNUCCI, B.; HRATCHIAN, H. P.; ORTIZ, J. V.; IZMAYLOV, A. F.; SONNENBERG, J. L.; ZAKRZEWSKI, V. G.; REGA, N.; ZHENG, G.; HADA, M.; EHARA, M.; TOYOTA, K.; FUKUDA, R.; HASEGAWA, J.; ISHIDA, M.; NAKAJIMA, T.; HONDA, Y.; KITAO, O.; NAKAI, H.; VREVEN, T.; MONTGOMERY Jr., J. A.; PERALTA, J. E.; OGLIARO, F.; BEARPARK, M. J.; HEYD, J. J.; BROTHERS, E. N.; KUDIN, K. N.; STAROVEROV, V. N.; KOBAYASHI, R.; NORMAND, J.; RAGHAVACHARI, K.; RENDELL, A. P.; BURANT, J. C.; IYENGAR, S. S.; TOMASI, J.; COSSI, M.; MILLAM, J. M.; KLENE, M.; ADAMO, C.; KNOX, J. E.; CROSS, J. B.; BAKKEN, V.; JARAMILLO, J.; YAZYEV, O.; AUSTIN, A. J.; STRATMANN, R. E.; CAMMI, R.; POMELLI, C.; OCHTERSKI, J. W.; MARTIN, R. L.; MOROKUMA, K.; VOTH, G. A.; SALVADOR, P.; DANNENBERG, J. J.; DAPPRICH, A. D. D. S.; FARKAS, O.; FORESMAN, J. B.;

- CIOŚŁOWSKI, J.; FOX, D. J. **Gaussian09 Revision A.02**. Wallingford: Gaussian, Inc., 2009.
- 55 MARCUS, H. D.; DONALD, C. E.; DAVID, L. C.; TIM, V.; EVA, Z.; GEOFFREY, H. R. Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. **Journal of Cheminformatics**, London, v. 4, n. 1, p. 4–17, 2012.
- 56 DENNINGTON, R.; KEITH, T. A.; MILLAM, J. M. **GaussView Version 6**. Shawnee Mission: Semichem Inc., 2019.
- 57 GUIMARÃES, A. R.; BARBOSA, R. C.; TELLO, A. C. M.; DA SILVA, A. P.; ALVES, J. M. A.; MARINGOLO, M. P.; DA SILVA, A. B. F. Generation, contraction, and polarisation of Gaussian basis sets for atomic and molecular calculations using the generator coordinate method with polynomial discretisation: Atoms from Na through Cl. **Physical Chemistry Chemical Physics**, Cambridge, v. 23, n. 31, p. 16989–16997, 2021.
- 58 VUCKOVIC, S.; BURKE, K. Quantifying and understanding errors in molecular geometries. **The journal of physical chemistry letters**, v. 11, n. 22, p. 9957–9964, 2020.
- 59 JENSEN, F. Method calibration or data fitting? **Journal of Chemical Theory and Computation**, v. 14, n. 9, p. 4651–4661, 2018.
- 60 DE OLIVEIRA, M. T.; ALVES, J. M. A.; BRAGA, A. A. C.; WILSON, D. J. D.; BARBOZA, C. A. Do Double-Hybrid Exchange - Correlation Functionals Provide Accurate Chemical Shifts? A Benchmark Assessment for Proton NMR. **Journal of Chemical Theory and Computation**, 2021. In Press.
- 61 BRÉMOND, É.; SAVARESE, M.; SU, N. Q.; PÉREZ-JIMÉNEZ, Á. J.; XU, X.; SANCHO-GARCÍA, J. C.; ADAMO, C. Benchmarking Density Functionals on Structural Parameters of Small-/Medium-Sized Organic Molecules. **Journal of Chemical Theory and Computation**, Washington, v. 12, n. 2, p. 459–465, 2016.
- 62 HAIT, D.; HEAD-GORDON, M. How Accurate Is Density Functional Theory at Predicting Dipole Moments? An Assessment Using a New Database of 200 Benchmark Values. **Journal of Chemical Theory and Computation**, Washington, v. 14, p. 1969–1981, 2018.
- 63 KRUSE, H.; GOERIGK, L.; GRIMME, S. Why the standard B3LYP/6-31G* model chemistry should not be used in DFT calculations of molecular thermochemistry: Understanding and correcting the problem. **Journal of Organic Chemistry**, Washington, v. 77, n. 23, p. 10824–10834, 2012.
- 64 HINCHLIFFE, A.; PEREZ, J. J.; MACHADO, H. J. S. Density functional studies of molecular polarizabilities Part 4: the C₁₀H₈ molecules azulene, fulvalene and naphthalene. **Electronic Journal of Theoretical Chemistry**, Chichester, v. 2, n. 1, p. 325–336, 1997.
- 65 GUSSONI, M.; RUI, M.; ZERBI, G. Electronic and relaxation contribution to linear molecular polarizability: an analysis of the experimental values. **Journal of Molecular Structure**, Amsterdam, v. 447, n. 3, p. 163–215, 1998.

66 DE SOUZA, F. A.; JORGE, F. E. Basis set convergence on static electric dipole polarizability calculations of alkali-metal clusters. **Journal of the Brazilian Chemical Society**, São Paulo, v. 24, n. 8, p. 1357–1365, 2013.

Anexos

ANEXO A – RESULTADOS DO CÁLCULO DE ENERGIA ATÔMICA PARA ÁTOMOS ANIÔNICOS, NEUTROS E CATIÔNICOS

Tabela 52: Valores de energia em Hartree para o átomo de Hidrogênio aniônico

Aniôn	Hidrogênio						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2flg	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	0,524486	0,5366489	0,5366489	0,5098858	0,5356672	0,5335001	0,536349
BHHLYP	0,5136225	0,5234512	0,523451	0,5000275	0,5229784	0,5214498	0,5233738
BLYP	0,5154838	0,5307917	0,530792	0,499705	0,5287323	0,5258493	0,5299243
PBE	0,5132311	0,5244794	0,530792	0,4994845	0,5236707	0,521649	0,5242433
HF	0,4795176	0,4879284	0,487928	0,4666917	0,4876396	0,4865539	0,4879168
CCSD(T)	0,5108745	0,5205123	0,526043	0,4963123	0,5265622	0,5243921	0,5274456
CISD	0,5108744	0,5205122	0,5260432	0,4963123	0,5265622	0,524392	0,5274456
MP2	0,5027256	0,510274	0,5153165	0,4891014	0,5159109	0,5147954	0,5174518

Tabela 53: Valores de energia em Hartree para o átomo de Lítio aniônico

Ânion	Lítio						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2flg	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	7,5123385	7,5123385	7,5123385	7,5052969	7,5124585	7,5128611	7,5134396
BHHLYP	7,4994275	7,4994275	7,499427	7,4923489	7,4994578	7,4994918	7,4999356
BLYP	7,497844	7,497844	7,497844	7,489555	7,4978128	7,4985512	7,4995546
PBE	7,4847377	7,4847377	7,4847377	7,4792077	7,4847622	7,4849409	7,4853097
HF	7,4282282	7,4282282	7,428228	7,4192763	7,4281446	7,4276499	7,4281409
CCSD(T)	7,4360251	7,4360251	7,4364819	7,450321	7,4552761	7,4550498	7,4553171
CISD	7,4360252	7,4360252	7,4364823	7,4503214	7,4552761	7,4550498	7,4553169
MP2	7,4311326	7,4282282	7,4321874	7,4381796	7,4455079	7,4443163	7,445672

Tabela 54: Valores de energia em Hartree para o átomo de Boro aniônico

Ânions	Boro						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2flg	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	24,6757951	24,6832443	24,6833476	24,6636945	24,680708	24,6816059	24,6837689
BHHLYP	24,6563971	24,6609568	24,661222	24,6462296	24,659906	24,660674	24,6616718
BLYP	24,6607197	24,6727354	24,672773	24,6464014	24,667333	24,6684549	24,672572
PBE	24,6312724	24,6374662	24,6376809	24,6205429	24,635533	24,6363692	24,6380277
HF	24,5184811	24,5205657	24,521771	24,5100311	24,520947	24,5216499	24,5219706
CCSD(T)	24,6007154	24,5929285	24,6072393	24,5905737	24,60688	24,6094291	24,6104582
CISD	24,5972251	24,5889835	24,6026384	24,5874666	24,602281	24,6047107	24,6054097
MP2	24,5796319	24,572079	24,5851948	24,5692785	24,584208	24,5884932	24,5892764

Tabela 55: Valores de energia em Hartree para o átomo de Carbono aniônico

Ânions	Carbono						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2flg	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	37,904525	37,9064409	37,9064409	37,8886418	37,909412	37,9116534	37,9127859
BHHLYP	37,8817292	37,8822049	37,882205	37,868361	37,8848739	37,8868381	37,8872987
BLYP	37,8887994	37,8931376	37,893138	37,8702176	37,895653	37,898252	37,900659
PBE	37,8525165	37,8542439	37,8542439	37,8381705	37,856749	37,8589144	37,8598067
HF	37,7068722	37,7070501	37,70705	37,6961486	37,708448	37,7101625	37,7102728
CCSD(T)	37,819788	37,8107599	37,8248962	37,806067	37,826603	37,8332274	37,8337651
CISD	37,8146897	37,8058494	37,8185342	37,8015874	37,819968	37,826131	37,8264886
MP2	37,8009291	37,792778	37,8055725	37,786998	37,806054	37,8146918	37,815155

Tabela 56: Valores de energia em Hartree para o átomo de Nitrogênio aniônico

Ânions	Nitrogênio						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2flg	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	54,6035196	54,6105388	54,610698	54,572267	54,610768	54,6138817	54,6183801
BHHLYP	54,5737319	54,5785457	54,578737	54,5466649	54,579149	54,5819781	54,5851094
BLYP	54,5917749	54,6020052	54,602143	54,5561905	54,601077	54,6045133	54,6107995
PBE	54,5330348	54,5404918	54,5406937	54,504298	54,539578	54,5426199	54,5472643
HF	54,3267764		54,325454	54,3038134	54,334526	54,3360811	
CCSD(T)	54,4936966			54,4628782	54,505904	54,5184875	
CISD	54,4841993			54,4553498	54,491889	54,5042471	
MP2	54,4727919			54,4425865	54,475804	54,4928099	

Tabela 57: Valores de energia em Hartree para o átomo de Oxigênio aniônico

Ânions	Oxigênio						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2flg	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	75,1515212	75,151711	75,1518003	75,114582	75,155815	75,1619112	75,1633693
BHHLYP	75,1135418	75,1119305	75,112053	75,0816998	75,115435	75,121124	75,1217739
BLYP	75,1431295	75,1459418	75,14602	75,10105	75,150022	75,1565912	75,1593374
PBE	75,0635738	75,0637663	75,0638749	75,0294167	75,06714	75,0731048	75,0744207
HF	74,7919829	74,7902128	74,790501	74,7661929	74,792218	74,7974866	74,7978128
CCSD(T)	75,0195131	75,0082589	75,0187817	74,9812664	75,02788	75,0514116	75,0525741
CISD	75,0053509	74,9931709	75,0022581	74,9701354	75,010516	75,0327342	75,0334308
MP2	75,0042969	74,991537	75,0022356	74,9656944	75,011329	75,0374785	75,0385847

Tabela 58: Valores de energia em Hartree para o átomo de Flúor aniônico

Ânions	Flúor						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2flg	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	99,8951302	99,9046223	99,9046223	99,8501767	99,895852	99,9050701	99,9061583
BHHLYP	99,8486562	99,8558111	99,855811	99,8101197	99,847023	99,855902	99,8563765
BLYP	99,8890941	99,9015109	99,901511	99,8377106	99,892334	99,9019095	99,9039504
PBE	99,7909538	99,8000502	99,8000502	99,7493671	99,790999	99,8000709	99,8010286
HF	99,4546026	99,4594438	99,459444	99,4242984	99,450807	99,4592414	99,4594089
CCSD(T)	99,7440171	99,7245567	99,7381145	99,6983836	99,749538	99,7846427	99,7855364
CISD	99,7257761	99,7066426	99,7185374	99,6837224	99,727849	99,7610459	99,7615958
MP2	99,7410008	99,7204315	99,7340195	99,6933875	99,745878	99,7831953	99,7840977

Tabela 59: Valores de energia em Hartree para o átomo de Sódio aniônico

Ânions	Sódio						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2flg	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	162,3109436	162,3225307	162,3225307	162,3132132	162,3184194	162,3239651	162,3243489
BHHLYP	162,28017	162,2930533	162,293053	162,2855841	162,2907167	162,2916522	162,291933
BLYP	162,296096	162,307945	162,307945	162,2956386	162,3018382	162,3104907	162,3112639
PBE	162,1914513	162,2022906	162,2022906	162,1961193	162,1999091	162,2019816	162,2021943
HF	161,8377679	161,8551126	161,855113	161,8474002	161,8541525	161,8465338	161,8468382
CCSD(T)	161,8438317	161,8700161	161,8701001	161,8740388	161,877985	161,8704074	161,870561
CISD	161,8438317	161,870016	161,8701001	161,8740388	161,8779849	161,8704072	161,8705609
MP2	161,8430233	161,8645095	161,8651642	161,8648085	161,8702027	161,8610016	161,8622994

Tabela 60: Valores de energia em Hartree para o átomo de Alumínio aniônico

Ânions	Alumínio						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2flg	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	242,4046922	242,4071755	242,4071755	242,4067232	242,4067232	242,4111449	242,4128877
BHHLYP	242,3797816	242,3825583	242,3825583	242,3828413	242,3828413	242,3836966	242,3847815
BLYP	242,3875021	242,3926481	242,3926481	242,3893399	242,3893399	242,3959354	242,3989909
PBE	242,2698425	242,272136	242,272136	242,2719977	242,2719977	242,2740585	242,2752223
HF	241,876268	241,878559	241,878559	241,8797892	241,8797892	241,874343	241,874932
CCSD(T)	241,9435512	241,9348523		241,9471028	241,9471028	241,9416489	241,9435967
CISD	241,9401884	241,932634	241,9326341	241,9433898	241,9433898	241,9380898	241,9396449
MP2	241,9256553	241,9188786	241,9188786	241,9286537	241,9286537	241,9249699	241,9266403

Tabela 61: Valores de energia em Hartree para o átomo de Silício aniônico

Ânions	Silício						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	289,4461051	289,4486265	289,4444166	289,4322039	289,4462839	289,4517248	289,452282
BHHLYP	289,4234696	289,4268447	289,421829	289,4128683	289,42477	289,4266899	289,4269889
BLYP	289,4271473	289,4295579	289,425802	289,4097492	289,4266808	289,4344558	289,4355813
PBE	289,3073991	289,310361	289,3058965	289,2965725	289,3080051	289,3113385	289,3117151
HF	288,8862136	288,8899805	288,884155	288,8780276	288,8880488	288,8839572	288,8840781
CCSD(T)	288,9836906	288,9774417	288,9782465	288,9718681	288,984853	288,9830471	288,9841472
CISD	288,9773578	288,9730374	288,9725353	288,9665317	288,9784099	288,9762994	288,9770854
MP2	288,9634826	288,9574659	288,9594744	288,951828	288,9643487	288,964451	288,9654463

Tabela 62: Valores de energia em Hartree para o átomo de Fósforo aniônico

Ânions	Fósforo						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	341,3215549	341,3141106	341,3141106	341,3036472	341,3216199	341,3271786	341,3282857
BHHLYP	341,2999025	341,2926534	341,292653	341,285338	341,3010169	341,3032304	341,3039327
BLYP	341,302791	341,2959048	341,295905	341,2813414	341,3023332	341,3100687	341,3118979
PBE	341,1691055	341,1618803	341,1618803	341,1542513	341,1696584	341,173284	341,174207
HF	340,7025699	340,6940984	340,694098	340,6899102	340,7046223	340,7009853	340,7017721
CCSD(T)	340,8433652	340,8163037	340,8163037	340,8231569	340,8447441	340,8475266	340,8495978
CISD	340,8322938	340,8081174	340,8081174	340,8140561	340,8332303	340,8353178	340,8368644
MP2	340,8165933	340,7943095	340,7943095	340,797112	340,8178912	340,8226121	340,8248083

Tabela 63: Valores de energia em Hartree para o átomo de Enxofre aniônico

Ânions	Enxofre						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	398,2200141	398,2208963	398,2217914	398,2062503	398,220364	398,2266468	398,2271681
BHHLYP	398,1990754	398,2001451	398,201255	398,188225	398,20017	398,2031517	398,2034624
BLYP	398,2006759	398,2017607	398,202596	398,1839134	398,200825	398,2092549	398,2101621
PBE	398,0559002	398,0567847	398,0579391	398,0445321	398,056703	398,0610903	398,0615379
HF	397,5410361	397,540442	397,542705	397,5319333	397,5425717	397,5400051	397,5402965
CCSD(T)	397,7278677	397,6596732	397,7148809	397,7084356	397,7277395	397,739135	397,7405326
CISD	397,7120687	397,6526104	397,7019295	397,695162	397,7114229	397,7211327	397,7221261
MP2	397,6995227	397,6419588	397,6905583	397,6810027	397,699398	397,7121294	397,7135762

Tabela 64: Valores de energia em Hartree para o átomo de Cloro aniônico

Ânions	Cloro						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	460,3159662	460,3141226	460,3141226	460,2975364	460,3105162	460,317171	460,3175398
BHHLYP	460,2948123	460,2944857	460,294486	460,2802699	460,2910217	460,2944068	460,2946105
BLYP	460,2964031	460,2933835	460,293384	460,2738387	460,2896121	460,2983811	460,2990266
PBE	460,1413303	460,1405824	460,1405824	460,1258874	460,1370554	460,1418614	460,142168
HF	459,5761821	459,5768408	459,576841	459,564666	459,5734815	459,5714571	459,5715901
CCSD(T)	459,8118202	459,7888041	459,8215775	459,7851302	459,8050418	459,8261495	459,8272498
CISD	459,7909518	459,7730885	459,800008	459,7680779	459,78433	459,8024971	459,8031126
MP2	459,7875489	459,7671163	459,7975529	459,7616215	459,7807919	459,8018968	459,8031126

Tabela 65: Valores de energia em Hartree para o átomo de Hidrogênio neutro

Neutro	Hidrogênio						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	0,502426	0,502376	0,5023759	0,502156	0,50226	0,502443	0,502443
BHHLYP	0,498772	0,498672	0,498672	0,498546	0,498604	0,498782	0,498782
BLYP	0,497884	0,497875	0,497875	0,497555	0,497722	0,497914	0,497914
PBE	0,501308	0,501175	0,501175	0,501038	0,501146	0,501321	0,501321
HF	0,499994	0,499775	0,499775	0,49981	0,499821	0,50000	0,50000
CCSD(T)	0,499994	0,4997748	0,4997748	0,49981	0,4998212	0,50000	0,50000
CISD	0,499994	0,499775	0,4997748	0,49981	0,4998212	0,50000	0,50000
MP2	0,499994	0,4997748	0,4997748	0,49981	0,4998212	0,50000	0,50000

Tabela 66: Valores de energia em Hartree para o átomo de Lítio neutro

Neutro	Lítio						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	7,491361	7,491361	7,4913613	7,492016	7,492054	7,49295	7,49295
BHHLYP	7,482929	7,482929	7,482929	7,48348	7,483507	7,483937	7,483938
BLYP	7,480376	7,480376	7,480376	7,481108	7,481175	7,482661	7,482661
PBE	7,466232	7,466232	7,466232	7,466586	7,466608	7,467197	7,467198
HF	7,432558	7,432558	7,432558	7,432702	7,432705	7,432667	7,432669
CCSD(T)	7,432558	7,4325582	7,4325582	7,432702	7,4327053	7,432667	7,432669
CISD	7,432558	7,4325582	7,4325582	7,432702	7,4327053	7,432667	7,432669
MP2	7,432558	7,4325582	7,4325582	7,432702	7,4327053	7,432667	7,432669

Tabela 67: Valores de energia em Hartree para o átomo de Boro neutro

Neutro	Boro						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	24,66533	24,664462	24,6645824	24,66376	24,663892	24,66561	24,66561
BHHLYP	24,65476	24,654223	24,654412	24,65355	24,653638	24,65494	24,65494
BLYP	24,65331	24,652087	24,652194	24,65126	24,651481	24,65371	24,65371
PBE	24,61955	24,618895	24,619077	24,61806	24,618181	24,6198	24,6198
HF	24,53294	24,532377	24,532997	24,53207	24,532172	24,53314	24,53315
CCSD(T)	24,6	24,595833	24,5992366	24,5981	24,598451	24,60157	24,60158
CISD	24,59869	24,594710	24,5978842	24,59683	24,597137	24,60012	24,60013
MP2	24,57848	24,5746126	24,5779937	24,57615	24,576577	24,58128	24,5813

Tabela 68: Valores de energia em Hartree para o átomo de Carbono neutro

Neutro	Carbono						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	37,86122	37,855309	37,8554529	37,85858	37,859061	37,86174	37,86174
BHHLYP	37,84904	37,844054	37,84427	37,84681	37,847128	37,84937	37,84937
BLYP	37,84869	37,841947	37,842077	37,8455	37,846237	37,84944	37,84944
PBE	37,80699	37,801678	37,801877	37,80443	37,804859	37,80743	37,80743
HF	37,69343	37,689755	37,69036	37,69157	37,691811	37,6937	37,6937
CCSD(T)	37,78422	37,773699	37,7815344	37,78076	37,759561	37,78842	37,78843
CISD	37,7817	37,771650	37,7788615	37,7783	37,77922	37,7855	37,78551
MP2	37,76241	37,7532435	37,7601355	37,75849	37,781826	37,76805	37,76808

Tabela 69: Valores de energia em Hartree para o átomo de Nitrogênio neutro

Neutro	Nitrogênio						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	54,60659	54,598798	54,5987984	54,60178	54,602891	54,60702	54,60702
BHHLYP	54,59285	54,586325	54,586325	54,5887	54,589449	54,59314	54,59314
BLYP	54,59258	54,583729	54,583729	54,58694	54,588525	54,59317	54,59317
PBE	54,54619	54,539221	54,539221	54,54159	54,542566	54,54658	54,54658
HF	54,40432	54,399438	54,399438	54,40069	54,401162	54,40451	54,40451
CCSD(T)	54,52109	54,508219	54,5149658	54,51471	54,516924	54,52836	54,52838
CISD	54,51775	54,505437	54,5114915	54,51152	54,513424	54,52435	54,52437
MP2	54,50322	54,4907860	54,49721	54,49662	54,498647	54,51204	54,51207

Tabela 70: Valores de energia em Hartree para o átomo de Oxigênio neutro

Neutro	Oxigênio						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	75,10001	75,089515	75,0895695	75,09186	75,09418	75,10093	75,10093
BHHLYP	75,08015	75,071056	75,071125	75,07293	75,074605	75,08086	75,08086
BLYP	75,08954	75,077913	75,077967	75,08029	75,083421	75,09072	75,09072
PBE	75,02201	75,012387	75,012457	75,01426	75,016266	75,0229	75,02291
HF	74,81818	74,811183	74,811351	74,81176	74,812982	74,81892	74,81892
CCSD(T)	74,98538	74,962886	74,9684051	74,97396	74,978952	75,00071	75,00074
CISD	74,97941	74,957693	74,962756	74,96838	74,972694	74,99361	74,99364
MP2	74,9662	74,9430948	74,9489079	74,9549	74,959294	74,98312	74,98316

Tabela 71: Valores de energia em Hartree para o átomo de Flúor neutro

Neutro	Flúor						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	99,77525	99,774641	99,7746817	99,76287	99,766141	99,77636	99,77636
BHHLYP	99,74885	99,748798	99,748855	99,73778	99,740097	99,74977	99,74978
BLYP	99,76683	99,765844	99,765882	99,75293	99,757394	99,7682	99,7682
PBE	99,68082	99,680618	99,680669	99,66903	99,671834	99,68192	99,68192
HF	99,41533	99,415438	99,415567	99,40553	99,406879	99,41624	99,41624
CCSD(T)	99,63732	99,606345	99,6148588	99,62036	99,627827	99,66107	99,66113
CISD	99,62873	99,599207	99,6071019	99,6123	99,618706	99,65073	99,65078
MP2	99,6222	99,5904825	99,5990634	99,60536	99,612106	99,64716	99,64723

Tabela 72: Valores de energia em Hartree para o átomo de Sódio neutro

Neutro	Sódio						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	162,2995	162,301005	162,3010055	162,297	162,29702	162,3028	162,3028
BHHLYP	162,2738	162,276365	162,276365	162,2741	162,27409	162,2752	162,2752
BLYP	162,2888	162,28941	162,28941	162,2836	162,28365	162,2927	162,2927
PBE	162,1813	162,1834	162,1834	162,1811	162,18112	162,1833	162,1833
HF	161,8559	161,858931	161,858931	161,858	161,85804	161,8506	161,8507
CCSD(T)	161,8559	161,858931	161,858931	161,858	161,85804	161,8506	161,8507
CISD	161,8559	161,858931	161,858931	161,858	161,85804	161,8506	161,8507
MP2	161,8559	161,8589310	161,858931	161,858	161,85804	161,8506	161,8507

Tabela 73: Valores de energia em Hartree para o átomo de Alumínio neutro

Neutro	Alumínio						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	242,3951	242,406875	242,4071755	242,3898	242,38979	242,3955	242,3955
BHHLYP	242,3758	242,382138	242,372324	242,3729	242,37286	242,3747	242,3747
BLYP	242,383	242,392388	242,374444	242,3756	242,37558	242,3839	242,3839
PBE	242,2559	242,25123	242,252049	242,2523	242,25229	242,2554	242,2554
HF	241,8804	241,877475	241,878013	241,8792	241,87917	241,8744	241,8744
CCSD(T)	241,9336	241,918243		241,9315	241,9315	241,9279	241,928
CISD	241,9324	241,916678	241,9255682	241,9304	241,93039	241,9267	241,9268
MP2	241,9178	241,9048408		241,9153	241,91527	241,913	241,9131

Tabela 74: Valores de energia em Hartree para o átomo de Silício neutro

Neutro	Silício						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	289,4015	289,394821	289,3951071	289,3963	289,39677	289,4028	289,4028
BHHLYP	289,385	289,379468	289,379926	289,3821	289,38237	289,3848	289,3848
BLYP	289,3883	289,380108	289,380352	289,3809	289,38154	289,39	289,39
PBE	289,2578	289,252602	289,253018	289,254	289,2543	289,2582	289,2582
HF	288,8578	288,851983	288,853419	288,8564	288,85663	288,853	288,853
CCSD(T)	288,9363	288,915255	288,93153	288,9331	288,93383	288,9328	288,9329
CISD	288,9332	288,913739	288,9285468	288,9303	288,93084	288,9294	288,9295
MP2	288,9159	288,8987505	288,9119507	288,9125	288,91328	288,9139	288,914

Tabela 75: Valores de energia em Hartree para o átomo de Fósforo neutro

Neutro	Fósforo						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	341,2925	341,27918	341,2791802	341,2859	341,28627	341,2926	341,2926
BHHLYP	341,2786	341,26701	341,26701	341,2744	341,27465	341,2775	341,2775
BLYP	341,2773	341,262723	341,262723	341,2685	341,26914	341,2778	341,2778
PBE	341,1456	341,13372	341,13372	341,1405	341,14081	341,1451	341,1451
HF	340,719	340,707686	340,707686	340,7163	340,71649	340,7136	340,7136
CCSD(T)	340,8267	340,773254	340,8063243	340,821	340,82221	340,8242	340,8243
CISD	340,8211	340,771696	340,8021551	340,816	340,81692	340,8181	340,8182
MP2	340,8053	340,7606388	340,787465	340,7996	340,80076	340,8045	340,8046

Tabela 76: Valores de energia em Hartree para o átomo de Enxofre neutro

Neutro	Enxofre						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	398,1457	398,139919	398,140966	398,1387	398,13931	398,1462	398,1462
BHHLYP	398,1328	398,128586	398,129843	398,128	398,12847	398,1319	398,1319
BLYP	398,1309	398,123567	398,124556	398,1218	398,12264	398,1318	398,1318
PBE	397,9858	397,980796	397,98217	397,9801	397,98068	397,9856	397,9856
HF	397,5129	397,507751	397,510417	397,5093	397,50987	397,5078	397,5079
CCSD(T)	397,6629	397,606386	397,65307	397,6533	397,65614	397,6655	397,6657
CISD	397,6534	397,602836	397,6450145	397,6448	397,64708	397,655	397,6552
MP2	397,6349	397,5897259	397,6282962	397,6258	397,62833	397,6389	397,6392

Tabela 77: Valores de energia em Hartree para o átomo de Cloro neutro

Neutro	Cloro						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	460,1824	460,178692	460,179066	460,1747	460,17533	460,1826	460,1826
BHHLYP	460,1699	460,168139	460,168579	460,1644	460,17533	460,1689	460,1689
BLYP	460,1672	460,161712	460,162072	460,1573	460,15824	460,1678	460,1678
PBE	460,0115	460,008943	460,009379	460,0052	460,00572	460,0112	460,0112
HF	459,4897	459,488607	459,489474	459,4854	459,48597	459,4846	459,4846
CCSD(T)	459,6856	459,668783	459,6912917	459,6718	459,67622	459,6942	459,6945
CISD	459,6719	459,658232	459,6774325	459,6598	459,66328	459,6789	459,6791
MP2	459,6564	459,6426698	459,6630692	459,6434	459,64733	459,6656	459,6659

Cátion

Tabela 78: Valores de energia em Hartree para o átomo de Lítio cátion

Cátion	Lítio						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	7,285445	7,285445	7,285445	7,285384	7,285401	7,286138	7,286138
BHHLYP	7,278245	7,278245	7,278245	7,278141	7,278169	7,279426	7,279426
BLYP	7,280977	7,280977	7,280977	7,280913	7,280922	7,281259	7,28126
PBE	7,262038	7,262038	7,262038	7,262004	7,262015	7,262458	7,262458
HF	7,23641	7,23641	7,23641	7,23638	7,23638	7,236359	7,23636
CCSD(T)	7,23641	7,236410	7,2364098	7,23638	7,2363804	7,236359	7,23636
CISD	7,23641	7,2364098	7,2364098	7,23638	7,2363804	7,236359	7,23636
MP2	7,23641	7,2364098	7,2364098	7,23638	7,2363804	7,236359	7,23636

Tabela 79: Valores de energia em Hartree para o átomo de Boro cátion

Cátion	Boro						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	24,34413	24,343373	24,343373	24,34274	24,342884	24,34432	24,34433
BHHLYP	24,33631	24,335199	24,335199	24,33455	24,334689	24,3366	24,3366
BLYP	24,33968	24,339248	24,339248	24,33861	24,338761	24,33981	24,33981
PBE	24,30181	24,301368	24,301368	24,30036	24,300494	24,30198	24,30198
HF	24,2375	24,237394	24,237394	24,23668	24,236816	24,23756	24,23756
CCSD(T)	24,27499	24,272902	24,2736246	24,27257	24,272821	24,27635	24,27635
CISD	24,29844	24,296898	24,2970188	24,29645	24,296627	24,29876	24,29877
MP2	24,29844	24,296898	24,2970188	24,29645	24,296627	24,29876	24,29877

Tabela 80: Valores de energia em Hartree para o átomo de Carbono cátion

Cátion	Carbono						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	37,4371	37,431265	37,431364	37,43479	37,434974	37,43755	37,43755
BHHLYP	37,42972	37,423067	37,423169	37,42712	37,427278	37,43036	37,43036
BLYP	37,43194	37,426996	37,427133	37,42988	37,430082	37,43224	37,43224
PBE	37,3839	37,378687	37,378812	37,38154	37,381717	37,38429	37,38429
HF	37,29661	37,293012	37,293377	37,29475	37,29496	37,2968	37,2968
CCSD(T)	37,34952	37,343256	37,345996	37,34544	37,345943	37,35315	37,35315
CISD	37,37296	37,366493	37,3689375	37,3693	37,369688	37,37501	37,37501
MP2	37,37412	37,367544	37,3701247	37,37042	37,370813	37,37629	37,37629

Tabela 81: Valores de energia em Hartree para o átomo de Nitrogênio cátion

Cátion	Nitrogênio						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	54,06782	54,060021	54,060074	54,06386	54,064041	54,06823	54,06823
BHHLYP	54,05973	54,050887	54,050944	54,05543	54,055563	54,06025	54,06025
BLYP	54,06216	54,055564	54,055632	54,05849	54,058701	54,06247	54,06247
PBE	54,00592	53,998905	53,998967	54,00197	54,002146	54,0063	54,0063
HF	53,89367	53,888639	53,888796	53,89017	53,890445	53,89392	53,89392
CCSD(T)	53,96825	53,957685	53,9608872	53,96168	53,962465	53,97452	53,97453
CISD	53,98862	53,978148	53,9809231	53,98241	53,983058	53,99297	53,99297
MP2	53,99061	53,979879	53,9828551	53,98432	53,985004	53,99522	53,99522

Tabela 82: Valores de energia em Hartree para o átomo de Oxigênio cátion

Cátion	Oxigênio						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	74,58067	74,570358	74,570358	74,57417	74,574383	74,58125	74,58125
BHHLYP	74,56987	74,55843	74,55843	74,56314	74,563285	74,57061	74,57061
BLYP	74,57536	74,566328	74,566328	74,56901	74,569287	74,57579	74,57579
PBE	74,51351	74,503948	74,503948	74,50696	74,507175	74,51404	74,51404
HF	74,37675	74,369602	74,369602	74,37037	74,37075	74,37709	74,37709
CCSD(T)	74,47842	74,456369	74,4590696	74,46801	74,469198	74,48812	74,48813
CISD	74,49263	74,471236	74,4733943	74,48248	74,483535	74,50028	74,50028
MP2	74,49495	74,473036	74,4753306	74,48467	74,485802	74,50301	74,50301

Tabela 83: Valores de energia em Hartree para o átomo de Flúor cátion

Cátion	Flúor						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	99,12406	99,123283	99,123316	99,11394	99,1142	99,12491	99,12492
BHHLYP	99,11657	99,115371	99,115404	99,10617	99,106354	99,11753	99,11753
BLYP	99,11304	99,112747	99,112788	99,10314	99,103497	99,1138	99,1138
PBE	99,04002	99,039574	99,039621	99,0299	99,030193	99,0409	99,0409
HF	98,84029	98,839909	98,839998	98,83026	98,830877	98,8411	98,8411
CCSD(T)	98,98967	98,958437	98,9637181	98,97349	98,975889	99,00685	99,00687
CISD	99,00292	98,972603	98,977467	98,98694	98,989319	99,01795	99,01796
MP2	99,00698	98,975605	98,9807016	98,9908	98,993366	99,02275	99,02276

Tabela 84: Valores de energia em Hartree para o átomo de Sódio cátion

Cátion	Sódio						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	162,1001	162,10152	162,10152	162,097714	162,097724	162,1032	162,103232
BHHLYP	162,0919	162,0924	162,0924	162,086895	162,086915	162,0956	162,095632
BLYP	162,08	162,082452	162,082452	162,080277	162,080281	162,0812	162,081247
PBE	161,987	161,988974	161,988974	161,986615	161,98662	161,9888	161,988766
HF	161,6741	161,676951	161,676951	161,676015	161,676019	161,6687	161,668708
CCSD(T)	161,6741	161,676951	161,6769507	161,6760155	161,6760188	161,6687	161,6687078
CISD	161,6741	161,6769507	161,6769507	161,6760155	161,6760188	161,6687	161,6687078
MP2	161,6741	161,6769507	161,6769507	161,6760155	161,6760188	161,6687	161,6687078

Tabela 85: Valores de energia em Hartree para o átomo de Alumínio cátion

Cátion	Alumínio						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	242,1737	242,167381	242,167381	242,168662	242,168662	242,1741	242,174058
BHHLYP	242,1672	242,158368	242,158368	242,160002	242,160002	242,168	242,168026
BLYP	242,1588	242,155315	242,155315	242,15624	242,15624	242,1578	242,157798
PBE	242,0318	242,028086	242,028086	242,02853	242,02853	242,0314	242,031381
HF	241,6743	241,672927	241,672927	241,673453	241,673453	241,6685	241,668533
CCSD(T)	241,7033	241,697482	241,7001971	241,7012671	241,7012671	241,6981	241,6981257
CISD	241,7146	241,711173	241,7118723	241,7130018	241,7130018	241,7088	241,7087684
MP2	241,7146	241,7111728	241,7118723	241,7130017	241,7130017	241,7088	241,7087684

Tabela 86: Valores de energia em Hartree para o átomo de Silício cátion

Cátion	Silício						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	289,1033	289,098662	289,098908	289,098205	289,098429	289,1046	289,104617
BHHLYP	289,0964	289,090059	289,09027	289,089268	289,089485	289,0981	289,098095
BLYP	289,0917	289,088407	289,08881	289,088729	289,088945	289,0916	289,091564
PBE	288,9558	288,952675	288,953037	288,951982	288,952203	288,9562	288,95623
HF	288,5772	288,574037	288,575341	288,575634	288,575863	288,5726	288,572587
CCSD(T)	288,62	288,613166	288,6191764	288,6169653	288,6174032	288,6173	288,6172971
CISD	288,6368	288,6290717	288,6355638	288,6341789	288,6345203	288,6328	288,6328267
MP2	288,6379	288,6297966	288,6366513	288,6351914	288,6355429	288,634	288,6339762

Tabela 87: Valores de energia em Hartree para o átomo de Fósforo cátion

Cátion	Fósforo						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	340,9108	340,896945	340,897444	340,904148	340,904342	340,911	340,911037
BHHLYP	340,9031	340,887935	340,888387	340,894435	340,894605	340,9036	340,903617
BLYP	340,9017	340,889279	340,889992	340,897282	340,897487	340,9008	340,900762
PBE	340,7587	340,745963	340,746663	340,753413	340,753601	340,7584	340,758364
HF	340,355	340,341454	340,343346	340,351924	340,352162	340,3498	340,349816
CCSD(T)	340,4196	340,388386	340,4062453	340,4143528	340,4149735	340,4178	340,4178157
CISD	340,4389	340,4029321	340,4243571	340,4340234	340,4345011	340,4353	340,4353233
MP2	340,4417	340,4040283	340,4268324	340,4366806	340,4371951	340,4384	340,438449

Tabela 88: Valores de energia em Hartree para o átomo de Enxofre cátion

Cátion	Enxofre						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	397,758	397,753573	397,753573	397,751091	397,751323	397,7583	397,758268
BHHLYP	397,7483	397,742177	397,742177	397,739494	397,739691	397,7488	397,74885
BLYP	397,7522	397,749652	397,749652	397,74734	397,747589	397,7512	397,751242
PBE	397,6036	397,600466	397,600466	397,598002	397,598212	397,6034	397,603357
HF	397,1736	397,172145	397,172145	397,170008	397,170298	397,1685	397,16851
CCSD(T)	397,2672	397,240633	397,2651888	397,2598118	397,2607112	397,2671	397,2671681
CISD	397,2847	397,2541123	397,2814541	397,2777916	397,2784893	397,2826	397,2825834
MP2	397,2898	397,2560933	397,2861518	397,2823665	397,2831378	397,2882	397,2882082

Tabela 89: Valores de energia em Hartree para o átomo de Cloro cátion

Cátion	Cloro						
	MCG	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-4	aug pc-4
B3LYP	459,7023	459,698598	459,698883	459,694568	459,694873	459,7025	459,702485
BHHLYP	459,693	459,687561	459,687839	459,683489	459,683748	459,6935	459,693532
BLYP	459,6969	459,695105	459,695436	459,691167	459,691507	459,6959	459,695881
PBE	459,5355	459,53302	459,533357	459,529038	459,529344	459,5352	459,535242
HF	459,0574	459,056402	459,0571	459,052741	459,053228	459,0524	459,052449
CCSD(T)	459,1874	459,179483	459,1914398	459,1763097	459,1782035	459,192	459,1921006
CISD	459,2076	459,198818	459,2099442	459,1970041	459,1986899	459,2102	459,2103085
MP2	459,2163	459,2059197	459,2186114	459,2047767	459,2066867	459,2199	459,2199557

ANEXO B – DETALHES DAS GEOMETRIAS OTIMIZADAS

Tabela 90: Valores de comprimento de ligação para cálculos
tipo DFT

Moléculas	Numeração		aMCG	aMCG	aMCG	aMCG	aMCG	aMCG	aMCG	aMCG	aMCG	aMCG
			2d1f	3d2f1g	2d1f	3d2f1g	2d1f	3d2f1g	2d1f	3d2f1g	2d1f	3d2f1g
			B3LYP		BHHLYP		BLYP		PBE0			
BF ₄ ⁻	1 B	R(1,2)	1,410	1,410	1,394	1,394	1,426	1,426	1,404	1,404	1,404	1,404
	2 F	R(1,3)	1,410	1,410	1,394	1,394	1,426	1,426	1,404	1,404	1,404	1,404
	3 F	R(1,4)	1,410	1,410	1,394	1,394	1,426	1,426	1,404	1,404	1,404	1,404
	4 F	R(1,5)	1,410	1,410	1,394	1,394	1,426	1,426	1,404	1,404	1,404	1,404
	5 F											
BH ₄ ⁻	1 B	R(1,5)	1,237	1,235	1,232	1,230	1,243	1,241	1,239	1,239	1,238	1,238
	2 H	R(2,5)	1,237	1,235	1,232	1,230	1,243	1,241	1,239	1,239	1,238	1,238
	3 H	R(3,5)	1,237	1,235	1,232	1,230	1,243	1,241	1,239	1,239	1,238	1,238
	4 H	R(4,5)	1,237	1,235	1,232	1,230	1,243	1,241	1,239	1,239	1,238	1,238
	5 H											
CO ₃ ⁻²	1 C	R(1,2)	1,297	1,297	1,289	1,289					1,299	1,299
	2 O	R(1,3)	1,288	1,288	1,289	1,289					1,299	1,299
	3 O	R(1,4)	1,288	1,288	1,289	1,289					1,299	1,299
	4 O											
HCO ₃ ⁻	1 C	R(1,2)	1,250	1,250	1,454	1,454	1,261	1,486	1,247	1,247	1,247	1,247
	2 O	R(1,3)	1,234	1,233	1,224	1,224	1,245	1,261	1,231	1,231	1,231	1,231
	3 O	R(1,4)	1,446	1,446	1,224	1,224	1,486	1,244	1,429	1,429	1,429	1,429
	4 O	R(4,5)	0,963	0,963	0,949		0,974	0,974	0,961	0,961	0,961	0,961
	5 H											
NO ₂ ⁻	1 N	R(1,2)	1,257	1,256	1,234	1,234	1,280	1,279	1,247	1,247	1,246	1,246

Continuação da tabela											
	2 O 3 O	R(1,3)	1,257	1,256	1,234	1,234	1,234	1,280	1,279	1,247	1,246
NO ₃ ⁻	1 N	R(1,2)	1,259	1,258	1,237	1,237	1,237		1,281	1,249	1,248
	2 O	R(1,3)	1,259	1,258	1,237	1,237	1,237		1,281	1,249	1,248
	3 O	R(1,4)	1,259	1,258	1,237	1,237	1,237		1,281	1,249	1,248
	4 O										
	1 O 2 H	R(1,2)	0,966	0,965	0,954	0,954	0,953	0,977	0,976	0,963	0,962
AlF ₂ H	1 Al	R(1,2)	1,645	1,643	1,627	1,627	1,625	1,662	1,659	1,639	1,637
	2 F	R(1,3)	1,645	1,643	1,627	1,627	1,625	1,662	1,659	1,639	1,637
	3 F	R(1,4)	1,555	1,553	1,546	1,546	1,545	1,564	1,561	1,561	1,559
	4 H										
	1 Al 2 F 3 F 4 F	R(1,2) R(1,3) R(1,4)	1,634 1,634 1,634	1,633 1,633 1,633	1,616 1,616 1,616	1,616 1,616 1,616	1,615 1,615 1,615	1,651 1,651 1,651	1,649 1,649 1,649	1,629 1,629 1,629	1,627 1,627 1,627
AlFH ₂	1 Al	R(1,2)		1,654			1,636	1,674	1,671	1,651	1,648
	2 F	R(1,3)		1,569			1,560	1,581	1,578	1,578	1,575
	3 H	R(1,4)		1,569			1,560	1,581	1,578	1,578	1,575
	4 H										
	1 Al 2 H 3 H 4 H	R(1,2) R(1,3) R(1,4)	1,583 1,583 1,583	1,579 1,579 1,579	1,574 1,574 1,574	1,574 1,574 1,574	1,569 1,569 1,569	1,592 1,592 1,592	1,588 1,588 1,588	1,589 1,589 1,589	1,585 1,585 1,585
BF ₃	1 F	R(1,4)	1,314	1,314	1,300	1,300	1,300	1,327	1,327	1,310	1,309
	2 F	R(2,4)	1,314	1,314	1,300	1,300	1,300	1,327	1,327	1,310	1,309

Continuação da tabela											
	3 F 4 B	R(3,4)	1,314	1,314	1,300	1,300	1,300	1,327	1,327	1,309	1,309
BH ₃	1 H	R(1,2)	1,188	1,188	1,183	1,182	1,194	1,192	1,193	1,192	1,192
	2 H	R(1,3)	1,188	1,188	1,183	1,182	1,194	1,192	1,193	1,192	1,192
	3 H	R(1,4)	1,188	1,188	1,183	1,182	1,194	1,192	1,193	1,192	1,192
	4 B										
C ₂ H ₄ O ₂	1 C	R(1,2)	1,196	1,196	1,184	1,184	1,209	1,208	1,194	1,194	1,194
	2 O	R(1,3)	1,362	1,363	1,343	1,343	1,383	1,383	1,352	1,352	1,352
	3 O	R(1,5)	1,512	1,511	1,501	1,501	1,523	1,524	1,505	1,505	1,505
	4 H	R(3,4)	0,964	0,964	0,952	0,951	0,975	0,975	0,961	0,961	0,961
	5 C	R(5,6)	1,092	1,091	1,084	1,084	1,098	1,097	1,093	1,092	1,092
	6 H	R(5,7)	1,092	1,091	1,084	1,084	1,098	1,097	1,093	1,092	1,092
	7 H	R(5,8)	1,085	1,085	1,078	1,077	1,092	1,091	1,086	1,086	1,086
	8 H										
C ₃ H ₆ O ₂	1 C	R(1,2)	1,197	1,197	1,184	1,184	1,209	1,208	1,195	1,194	1,194
	2 O	R(1,3)	1,362	1,362	1,343	1,343	1,383	1,383	1,351	1,352	1,352
	3 O	R(1,5)	1,519	1,518	1,507	1,507	1,531	1,531	1,511	1,511	1,511
	4 H	R(3,4)	0,964	0,964	0,952	0,952	0,975	0,975	0,961	0,961	0,961
	5 C	R(5,6)	1,095	1,094	1,087	1,086	1,102	1,100	1,096	1,096	1,096
	6 H	R(5,7)	1,095	1,094	1,087	1,086	1,102	1,100	1,096	1,096	1,096
	7 H	R(5,8)	1,523	1,522	1,513	1,513	1,534	1,534	1,514	1,514	1,514
	8 C	R(8,9)	1,089	1,088	1,081	1,081	1,095	1,094	1,090	1,089	1,089
	9 H	R(8,10)	1,090	1,089	1,082	1,082	1,096	1,095	1,090	1,090	1,090
	10 H	R(8,11)	1,089	1,088	1,081	1,081	1,095	1,094	1,090	1,089	1,089
	11 H										
	1 C	R(1,2)	1,083	1,083		1,075	1,090	1,089	1,085		1,084

Continuação da tabela										
	2 H	R(1,3)	1,081	1,080		1,073	1,087	1,086	1,082	1,082
	3 H	R(1,4)	1,334	1,334		1,322	1,345	1,345	1,332	1,332
	4 C	R(4,5)	1,086	1,085		1,077	1,093	1,092	1,087	1,087
	5 H	R(4,6)	1,452	1,452		1,449	1,456	1,457	1,449	1,449
	6 C	R(6,7)	1,086	1,085		1,077	1,093	1,092	1,087	1,087
	7 H	R(6,8)	1,334	1,334		1,322	1,345	1,345	1,332	1,332
	8 C	R(8,9)	1,083	1,083		1,075	1,090	1,089	1,085	1,084
	9 H	R(8,10)	1,081	1,080		1,073	1,087	1,086	1,082	1,082
	10 H									
C ₄ H ₈ O ₂	1 C	R(1,2)		1,197	1,184	1,184	1,209	1,208	1,195	1,194
	2 O	R(1,3)		1,363	1,344	1,343	1,384	1,384	1,352	1,352
	3 O	R(1,5)		1,518	1,507	1,506	1,530	1,530	1,511	1,510
	4 H	R(3,4)		0,964	0,952	0,951	0,975	0,975	0,962	0,961
	5 C	R(5,6)		1,095	1,088	1,087	1,103	1,101	1,097	1,097
	6 H	R(5,7)		1,095	1,088	1,087	1,103	1,101	1,097	1,097
	7 H	R(5,8)		1,525	1,515	1,515	1,537	1,537	1,517	1,517
	8 C	R(8,9)		1,090	1,083	1,083	1,098	1,097	1,092	1,092
	9 H	R(8,10)		1,090	1,083	1,083	1,098	1,097	1,092	1,092
	10 H	R(8,11)		1,527	1,517	1,517	1,538	1,538	1,518	1,518
	11 C	R(11,12)		1,092	1,085	1,084	1,099	1,098	1,093	1,093
	12 H	R(11,13)		1,090	1,083	1,082	1,097	1,096	1,091	1,091
	13 H	R(11,14)		1,092	1,085	1,084	1,099	1,098	1,093	1,093
	14 H									
	1 C	R(1,2)	1,197	1,197	1,185	1,184		1,208	1,195	1,194
	2 O	R(1,3)	1,363	1,363	1,343	1,343		1,384	1,352	1,352
	3 O	R(1,5)	1,518	1,518	1,507	1,506		1,530	1,511	1,510

Continuação da tabela										
	4 H	R(3,4)	0,964	0,964	0,952	0,951		0,975	0,962	0,961
	5 C	R(5,6)	1,096	1,095	1,088	1,087		1,101	1,097	1,097
	6 H	R(5,7)	1,096	1,095	1,088	1,087		1,101	1,097	1,097
	7 H	R(5,8)	1,525	1,525	1,514	1,514		1,537	1,516	1,516
	8 C	R(8,9)	1,092	1,091	1,084	1,084		1,098	1,093	1,093
	9 H	R(8,10)	1,092	1,091	1,084	1,084		1,098	1,093	1,093
	10 H	R(8,11)	1,528	1,528	1,518	1,518		1,540	1,520	1,520
	11 C	R(11,12)	1,095	1,094	1,087	1,087		1,100	1,096	1,095
	12 H	R(11,13)	1,095	1,094	1,087	1,087		1,100	1,096	1,095
	13 H	R(11,14)	1,527	1,527	1,517	1,517		1,539	1,519	1,519
	14 C	R(14,15)	1,092	1,091	1,084	1,084		1,097	1,093	1,092
	15 H	R(14,16)	1,091	1,090	1,083	1,083		1,096	1,091	1,091
	16 H	R(14,17)	1,092	1,091	1,084	1,084		1,097	1,093	1,092
	17 H									
C ₆ H ₅ OCH ₃	1 C	R(1,2)		1,390		1,380		1,400		1,386
	2 C	R(1,6)		1,390		1,381		1,400		1,387
	3 C	R(1,7)		1,081		1,074		1,088		1,083
	4 C	R(2,3)		1,391		1,381		1,401		1,388
	5 C	R(2,8)		1,081		1,074		1,087		1,083
	6 C	R(3,4)		1,391		1,381		1,401		1,388
	7 H	R(3,12)		1,379		1,364		1,395		1,370
	8 H	R(4,5)		1,390		1,380		1,400		1,386
	9 H	R(4,9)		1,081		1,074		1,087		1,083
	10 H	R(5,6)		1,390		1,381		1,400		1,387
	11 H	R(5,10)		1,081		1,074		1,088		1,083
	12 O	R(6,11)		1,081		1,073		1,087		1,082

Continuação da tabela										
	13 C	R(12,13)		1,425		1,408		1,444		1,413
	14 H	R(13,14)		1,093		1,085		1,100		1,095
	15 H	R(13,15)		1,087		1,079		1,093		1,089
	16 H	R(13,16)		1,093		1,085		1,100		1,095
C ₆ H ₆	1 C	R(1,2)	1,391	1,390	1,381	1,381	1,401	1,400	1,387	1,387
	2 C	R(1,6)	1,391	1,390	1,381	1,381	1,400	1,400	1,387	1,387
	3 C	R(1,7)	1,082	1,081	1,074	1,074	1,089	1,088	1,083	1,083
	4 C	R(2,3)	1,391	1,390	1,381	1,381	1,400	1,400	1,387	1,387
	5 C	R(2,8)	1,082	1,081	1,074	1,074	1,089	1,088	1,083	1,083
	6 C	R(3,4)	1,391	1,390	1,381	1,381	1,401	1,400	1,387	1,387
	7 H	R(3,9)	1,082	1,081	1,074	1,074	1,089	1,088	1,083	1,083
	8 H	R(4,5)	1,391	1,390	1,381	1,381	1,400	1,400	1,387	1,387
	9 H	R(4,10)	1,082	1,081	1,074	1,074	1,089	1,088	1,083	1,083
	10 H	R(5,6)	1,391	1,390	1,381	1,381	1,400	1,400	1,387	1,387
	11 H	R(5,11)	1,082	1,081	1,074	1,074	1,089	1,088	1,083	1,083
	12 H	R(6,12)	1,082	1,081	1,074	1,074	1,089	1,088	1,083	1,083
CF ₄	1 C	R(1,2)	1,326	1,326	1,307	1,307	1,345	1,345	1,318	1,318
	2 F	R(1,3)	1,326	1,326	1,307	1,307	1,345	1,345	1,318	1,318
	3 F	R(1,4)	1,326	1,326	1,307	1,307	1,345	1,345	1,318	1,318
	4 F	R(1,5)	1,326	1,326	1,307	1,307	1,345	1,345	1,318	1,318
	5 F									
CH ₂ F ₂	1 C	R(1,2)	1,091	1,090	1,082	1,082	1,097	1,096	1,092	1,092
	2 H	R(1,3)	1,091	1,090	1,082	1,082	1,097	1,096	1,092	1,092
	3 H	R(1,4)	1,362	1,362	1,343	1,343	1,382	1,382	1,351	1,352
	4 F	R(1,5)	1,362	1,362	1,343	1,343	1,382	1,382	1,351	1,352

Continuação da tabela										
	5 F									
CH ₃ F	1 C	R(1,2)	1,090	1,089	1,082	1,081	1,097	1,096	1,091	1,091
	2 H	R(1,3)	1,090	1,089	1,082	1,081	1,097	1,096	1,091	1,091
	3 H	R(1,4)	1,090	1,089	1,082	1,081	1,097	1,096	1,091	1,091
	4 H	R(1,5)	1,390	1,390	1,371	1,371	1,411	1,411	1,377	1,378
	5 F									
CH ₄	1 C	R(1,2)	1,088	1,087	1,081	1,081	1,095	1,094	1,089	1,088
	2 H	R(1,3)	1,088	1,087	1,081	1,081	1,095	1,094	1,089	1,088
	3 H	R(1,4)	1,088	1,087	1,081	1,081	1,095	1,094	1,089	1,088
	4 H	R(1,5)	1,088	1,087	1,081	1,081	1,095	1,094	1,089	1,088
	5 H									
CHF ₃	1 C	R(1,2)	1,090	1,089	1,080	1,080	1,096	1,095	1,092	1,092
	2 H	R(1,3)	1,341	1,341	1,322	1,322	1,360	1,359	1,331	1,332
	3 F	R(1,4)	1,341	1,341	1,322	1,322	1,360	1,359	1,331	1,332
	4 F	R(1,5)	1,341	1,341	1,322	1,322	1,360	1,359	1,331	1,332
	5 F									
CO	1 O	R(1,2)	1,125	1,125	1,113	1,112	1,137	1,137	1,124	1,123
	2 C									
CO ₂	1 C	R(1,2)	1,160	1,160	1,146	1,146	1,173	1,173	1,157	1,157
	2 O	R(1,3)	1,160	1,160	1,146	1,146	1,173	1,173	1,157	1,157
	3 O									
F ₂	1 F	R(1,2)	1,399	1,398	1,362	1,362	1,435	1,434	1,378	1,377
	2 F									
H ₂	1 H	R(1,2)	0,744	0,743	0,738	0,737	0,748	0,746	0,746	0,745
	2 H									
	1 C	R(1,2)	1,204	1,203	1,191	1,190		1,215	1,202	1,200

Continuação da tabela										
	2 O	R(1,3)	1,338	1,339	1,320	1,321		1,358	1,330	1,331
	3 O	R(1,4)	1,338	1,339	1,320	1,321		1,358	1,330	1,331
	4 O	R(3,6)	0,966	0,966	0,954	0,954		0,976	0,963	0,963
	5 H	R(4,5)	0,966	0,966	0,954	0,954		0,976	0,963	0,963
	6 H									
H_2PO_4^-	1,0 P	R(1,2)	1,500	1,500	1,482	1,482	1,517	1,517	1,496	1,496
	2 O	R(1,3)	1,480	1,481	1,464	1,464	1,497	1,497	1,476	1,476
	3 O	R(1,4)	1,658	1,658	1,630	1,631	1,687	1,687	1,647	1,648
	4 O	R(1,5)	1,657	1,658	1,630	1,630	1,687	1,687	1,647	1,648
	5 O	R(4,6)	0,962	0,961	0,950	0,949	0,972	0,972	0,959	0,959
	6 H	R(5,7)	0,962	0,961	0,950	0,949	0,972	0,972	0,959	0,959
	7 H									
H_2SO_4	1 S	R(1,2)	1,431	1,433		1,414		1,453		1,427
	2 O	R(1,3)	1,414	1,417		1,398		1,436		1,411
	3 O	R(1,4)	1,591	1,596		1,563		1,634		1,582
	4 O	R(1,5)	1,591	1,596		1,563		1,634		1,582
	5 O	R(4,6)	0,968	0,968		0,956		0,978		0,965
	6 H	R(5,7)	0,968	0,968		0,956		0,978		0,965
	7 H									
H_3PO_4	1,0 P	R(1,2)	1,448	1,448		1,433	1,474	1,464	1,455	1,445
	2 O	R(1,3)	1,600	1,600		1,578	1,606	1,624	1,577	1,593
	3 O	R(1,5)	1,600	1,600		1,578	1,615	1,624	1,585	1,593
	4 O	R(1,6)	1,600	1,600		1,578	1,628	1,624	1,596	1,593
	5 O	R(3,4)	0,962	0,961		0,950	0,974	0,972	0,961	0,959
	6 H	R(5,7)	0,962	0,961		0,950	0,974	0,972	0,961	0,959
	7 H	R(6,8)	0,962	0,961		0,950	0,974	0,972	0,962	0,959

Continuação da tabela											
	8 H										
HCl	1 Cl 2 H	R(1,2)	1,284	1,284	1,273	1,273	1,295	1,294	1,281		1,281
HF	1 H 2 F	R(1,2)	0,924	0,923	0,911	0,911	0,935	0,934	0,919		0,919
HPO ₄ ⁻²	1,0 P	R(1,2)		1,534	1,521	1,521	1,521				1,614
	2 O	R(1,3)		1,524	1,508	1,508	1,508				1,581
	3 O	R(1,4)		1,524	1,713	1,508	1,508				1,553
	4 O	R(1,5)		1,725	1,508	1,714	1,714				1,879
	5 O	R(5,6)		0,961	0,949	0,949	0,949				0,962
	6 H										
HSO ₄ ⁻	1 S	R(1,2)		1,466			1,445	1,494			1,459
	2 O	R(1,3)		1,454			1,434	1,512			1,448
	3 O	R(1,4)		1,455			1,434	1,493			1,448
	4 O	R(1,5)		1,682			1,635	1,754			1,660
	5 O	R(5,6)		0,962			0,950	0,963			0,960
	6 H										
LiH	1 Li 2 H	R(1,2)	1,584	1,588	1,574	1,583	1,594	1,593	1,589		1,596
NaCl	1 Na 2 Cl	R(1,2)	2,375	2,373	2,362	2,361	2,391	2,388	2,367		2,366
NaH	1 Na 2 H	R(1,2)	1,882	1,881	1,875	1,875	1,891	1,889	1,888		1,888
O ₂	1 O 2 O	R(1,2)	1,208	1,207	1,181	1,180			1,196		1,195

Continuação da tabela										
O ₃	1 O	R(1,2)	1,257	1,256	1,224	1,223	1,291	1,290	1,241	1,240
	2 O	R(2,3)	1,257	1,256	1,224	1,223	1,291	1,290	1,241	1,240
	3 O									
PH ₃	1,0 P	R(1,2)	1,418	1,418	1,406	1,418	1,429	1,428	1,419	1,419
	2 H	R(1,3)	1,418	1,418	1,406	1,418	1,429	1,428	1,419	1,419
	3 H	R(1,4)	1,418	1,418	1,406	1,418	1,429	1,428	1,419	1,419
	4 H									
PO ₄ ⁻³	1,0 P	R(1,2)			1,563	1,563			1,569	1,535
	2 O	R(1,3)			1,563	1,563			1,535	1,535
	3 O	R(1,4)			1,563	1,563			1,535	1,569
	4 O	R(1,5)			1,563	1,563			1,570	1,569
	5 O									
SH ₂	1 S	R(1,2)	1,342	1,342	1,331	1,331	1,352	1,352	1,341	1,341
	2 H	R(1,3)	1,342	1,342	1,331	1,331	1,352	1,352	1,341	1,341
	3 H									
SiH ₄	1 Si	R(1,2)	1,483	1,479	1,475	1,471	1,491	1,487	1,487	1,484
	2 H	R(1,3)	1,483	1,479	1,475	1,471	1,491	1,487	1,487	1,484
	3 H	R(1,4)	1,483	1,479	1,475	1,471	1,491	1,487	1,487	1,484
	4 H	R(1,5)	1,483	1,479	1,475	1,471	1,491	1,487	1,487	1,484
	5 H									
SiO ₂	1 Si	R(1,2)	1,519	1,510	1,498	1,490	1,538	1,530	1,514	1,506
	2 O	R(1,3)	1,519	1,510	1,498	1,490	1,538	1,530	1,514	1,506
	3 O									
SO ₂	1 S	R(1,2)	1,438	1,440	1,412	1,414	1,463	1,464	1,430	1,432
	2 O	R(1,3)	1,438	1,440	1,412	1,414	1,463	1,464	1,430	1,432

Tabela 91: Valores de comprimento de ligação para cálculos HF e MP2

Moléculas	Numeração		aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g
			HF		MP2	
BF ₄ ⁻	1 B	R(1,2)	1,388	1,388	1,407	1,407
	2 F	R(1,3)	1,388	1,388	1,407	1,407
	3 F	R(1,4)	1,388	1,388	1,407	1,407
	4 F	R(1,5)	1,388	1,388	1,407	1,407
	5 F					
BH ₄ ⁻	1 B	R(1,5)	1,243	1,242	1,233	1,232
	2 H	R(2,5)	1,243	1,242	1,233	1,232
	3 H	R(3,5)	1,243	1,242	1,233	1,232
	4 H	R(4,5)	1,243	1,242	1,233	1,232
	5 H					
CO ₃ ⁻²	1 C	R(1,2)	1,280	1,281		1,309
	2 O	R(1,3)	1,280	1,281		1,309
	3 O	R(1,4)	1,280	1,281		1,309
	4 O					
HCO ₃ ⁻	1 C	R(1,2)		1,230	1,255	1,255
	2 O	R(1,3)		1,215	1,238	1,238
	3 O	R(1,4)		1,393	1,443	1,442
	4 O	R(4,5)		0,940	0,965	0,964
	5 H					
NO ₂ ⁻	1 N	R(1,2)	1,219	1,219	1,266	1,265
	2 O	R(1,3)	1,219	1,219	1,266	1,265
	3 O					
NO ₃ ⁻	1 N	R(1,2)	1,222	1,221	1,263	1,261
	2 O	R(1,3)	1,222	1,221	1,263	1,261
	3 O	R(1,4)	1,222	1,221	1,263	1,261
	4 O					
OH ⁻	1 O	R(1,2)		0,943	0,967	0,966
	2 H					
AlF ₂ H	1 Al	R(1,2)	1,616	1,618	1,644	1,646
	2 F	R(1,3)	1,616	1,618	1,644	1,646
	3 F	R(1,4)	1,552	1,553	1,547	1,552
	4 H					
AlF ₃	1 Al	R(1,2)	1,606	1,609	1,634	1,637
	2 F	R(1,3)	1,606	1,609	1,634	1,637
	3 F	R(1,4)	1,606	1,609	1,634	1,637
	4 F					
AlFH ₂	1 Al	R(1,2)	1,625	1,628	1,654	1,657
	2 F	R(1,3)	1,567	1,567	1,562	1,566
	3 H	R(1,4)	1,567	1,567	1,562	1,566
	4 H					
AlH ₃	1 Al	R(1,2)	1,577	1,577	1,571	1,575
	2 H	R(1,3)	1,577	1,577	1,571	1,575
	3 H	R(1,4)	1,577	1,577	1,571	1,575
	4 H					
BF ₃	1 F	R(1,4)	1,294	1,294	1,313	1,314
	2 F	R(2,4)	1,294	1,294	1,313	1,314
	3 F	R(3,4)	1,294	1,294	1,313	1,314
	4 B					
BH ₃	1 H	R(1,2)	1,188	1,187	1,186	1,186
	2 H	R(1,3)	1,188	1,187	1,186	1,186
	3 H	R(1,4)	1,188	1,187	1,186	1,186
	4 B					
C ₂ H ₄ O ₂	1 C	R(1,2)	1,175	1,175	1,203	1,203
	2 O	R(1,3)	1,334	1,334	1,363	1,364
	3 O	R(1,5)	1,508	1,508	1,503	1,504

Continuação da tabela						
	4 H	R(3,4)	0,941	0,941	0,964	0,964
	5 C	R(5,6)	1,084	1,084	1,087	1,088
	6 H	R(5,7)	1,084	1,084	1,087	1,088
	7 H	R(5,8)	1,077	1,077	1,081	1,082
	8 H					
C ₃ H ₆ O ₂	1 C	R(1,2)	1,176	1,176	1,204	
	2 O	R(1,3)	1,334	1,335	1,363	
	3 O	R(1,5)	1,513	1,513	1,509	
	4 H	R(3,4)	0,941	0,941	0,965	
	5 C	R(5,6)	1,086	1,086	1,090	
	6 H	R(5,7)	1,086	1,086	1,090	
	7 H	R(5,8)	1,520	1,520	1,514	
	8 C	R(8,9)	1,081	1,081	1,084	
	9 H	R(8,10)	1,083	1,083	1,085	
	10 H	R(8,11)	1,081	1,081	1,084	
	11 H					
C ₄ H ₆	1 C	R(1,2)	1,075	1,075	1,080	1,081
	2 H	R(1,3)	1,072	1,073	1,077	1,079
	3 H	R(1,4)	1,319	1,319	1,335	1,337
	4 C	R(4,5)	1,076	1,076	1,082	1,084
	5 H	R(4,6)	1,464	1,464	1,449	1,451
	6 C	R(6,7)	1,076	1,076	1,082	1,084
	7 H	R(6,8)	1,319	1,319	1,335	1,337
	8 C	R(8,9)	1,075	1,075	1,080	1,081
	9 H	R(8,10)	1,072	1,073	1,077	1,079
	10 H					
C ₄ H ₈ O ₂	1 C	R(1,2)	1,176	1,176	1,204	
	2 O	R(1,3)	1,334	1,335	1,363	
	3 O	R(1,5)	1,513	1,513	1,508	
	4 H	R(3,4)	0,941	0,941	0,965	
	5 C	R(5,6)	1,087	1,087	1,091	
	6 H	R(5,7)	1,087	1,087	1,091	
	7 H	R(5,8)	1,522	1,522	1,515	
	8 C	R(8,9)	1,082	1,082	1,087	
	9 H	R(8,10)	1,082	1,082	1,087	
	10 H	R(8,11)	1,524	1,524	1,518	
	11 C	R(11,12)	1,085	1,085	1,086	
	12 H	R(11,13)	1,083	1,083	1,088	
	13 H	R(11,14)	1,085	1,085	1,088	
	14 H					
C ₅ H ₁₀ O ₂	1 C	R(1,2)	1,176	1,176		
	2 O	R(1,3)	1,335	1,335		
	3 O	R(1,5)	1,513	1,513		
	4 H	R(3,4)	0,941	0,941		
	5 C	R(5,6)	1,087	1,087		
	6 H	R(5,7)	1,087	1,087		
	7 H	R(5,8)	1,522	1,522		
	8 C	R(8,9)	1,083	1,083		
	9 H	R(8,10)	1,083	1,083		
	10 H	R(8,11)	1,525	1,525		
	11 C	R(11,12)	1,087	1,087		
	12 H	R(11,13)	1,087	1,087		
	13 H	R(11,14)	1,524	1,524		
	14 C	R(14,15)	1,084	1,084		
	15 H	R(14,16)	1,083	1,083		
	16 H	R(14,17)	1,084	1,084		
	17 H					
	1 C	R(1,2)	1,381	1,382		
	2 C	R(1,6)	1,382	1,382		

Continuação da tabela						
	3 C	R(1,7)	1,073	1,073		
	4 C	R(2,3)	1,382	1,382		
	5 C	R(2,8)	1,073	1,073		
	6 C	R(3,4)	1,382	1,382		
	7 H	R(3,12)	1,358	1,359		
	8 H	R(4,5)	1,381	1,381		
	9 H	R(4,9)	1,073	1,073		
	10 H	R(5,6)	1,382	1,382		
	11 H	R(5,10)	1,073	1,073		
	12 O	R(6,11)	1,072	1,073		
	13 C	R(12,13)	1,403	1,403		
	14 H	R(13,14)	1,084	1,084		
	15 H	R(13,15)	1,079	1,079		
	16 H	R(13,16)	1,084	1,084		
C ₆ H ₆	1 C	R(1,2)	1,382	1,382	1,389	
	2 C	R(1,6)	1,382	1,382	1,389	
	3 C	R(1,7)	1,073	1,073	1,079	
	4 C	R(2,3)	1,382	1,382	1,389	
	5 C	R(2,8)	1,073	1,073	1,079	
	6 C	R(3,4)	1,382	1,382	1,389	
	7 H	R(3,9)	1,073	1,073	1,079	
	8 H	R(4,5)	1,382	1,382	1,389	
	9 H	R(4,10)	1,073	1,073	1,079	
	10 H	R(5,6)	1,382	1,382	1,389	
	11 H	R(5,11)	1,073	1,073	1,079	
	12 H	R(6,12)	1,073	1,073	1,079	
CF ₄	1 C	R(1,2)	1,296	1,296	1,321	1,320
	2 F	R(1,3)	1,296	1,296	1,321	1,320
	3 F	R(1,4)	1,296	1,296	1,321	1,320
	4 F	R(1,5)	1,296	1,296	1,321	1,320
	5 F					
CH ₂ F ₂	1 C	R(1,2)	1,079	1,079	1,084	1,085
	2 H	R(1,3)	1,079	1,079	1,084	1,085
	3 H	R(1,4)	1,333	1,333	1,358	1,358
	4 F	R(1,5)	1,333	1,333	1,358	1,358
	5 F					
CH ₃ F	1 C	R(1,2)	1,081	1,081	1,084	1,085
	2 H	R(1,3)	1,081	1,081	1,084	1,085
	3 H	R(1,4)	1,081	1,081	1,084	1,085
	4 H	R(1,5)	1,361	1,361	1,386	1,387
	5 F					
CH ₄	1 C	R(1,2)	1,082	1,082	1,082	1,084
	2 H	R(1,3)	1,082	1,082	1,082	1,084
	3 H	R(1,4)	1,082	1,082	1,082	1,084
	4 H	R(1,5)	1,082	1,082	1,082	1,084
	5 H					
CHF ₃	1 C	R(1,2)	1,077	1,077	1,083	1,084
	2 H	R(1,3)	1,311	1,311	1,335	1,335
	3 F	R(1,4)	1,311	1,311	1,335	1,335
	4 F	R(1,5)	1,311	1,311	1,335	1,335
	5 F					
CO	1 O	R(1,2)	1,104	1,103	1,138	1,137
	2 C					
CO ₂	1 C	R(1,2)	1,136	1,136	1,170	1,169
	2 O	R(1,3)	1,136	1,136	1,170	1,169
	3 O					
F ₂	1 F	R(1,2)	1,330	1,330	1,405	1,401
	2 F					

Continuação da tabela						
H ₂	1 H 2 H	R(1,2)	0,734	0,734	0,737	0,737
H ₂ CO ₃	1 C 2 O 3 O 4 O 5 H 6 H	R(1,2) R(1,3) R(1,4) R(3,6) R(4,5)	1,183 1,311 1,311 0,944 0,944	1,182 1,312 1,312 0,944 0,944		1,207 1,339 1,339 0,966 0,966
H ₂ PO ₄ ⁻	1,0 P 2 O 3 O 4 O 5 O 6 H 7 H	R(1,2) R(1,3) R(1,4) R(1,5) R(4,6) R(5,7)	1,470 1,452 1,615 1,614 0,939 0,939	1,472 1,454 1,618 1,617 0,939 0,939	1,499 1,480 1,646 1,646 0,962 0,962	
H ₂ SO ₄	1 S 2 O 3 O 4 O 5 O 6 H 7 H	R(1,2) R(1,3) R(1,4) R(1,5) R(4,6) R(5,7)	1,398 1,382 1,540 1,540 0,946 0,946	1,400 1,385 1,544 1,544 0,946 0,946	1,428 1,411 1,579 1,579 0,968 0,968	
H ₃ PO ₄	1,0 P 2 O 3 O 4 O 5 O 6 H 7 H 8 H	R(1,2) R(1,3) R(1,5) R(1,6) R(3,4) R(5,7) R(6,8)	1,421 1,565 1,565 1,565 0,940 0,940 0,940	1,423 1,568 1,568 1,568 0,940 0,940 0,940	1,449 1,592 1,592 1,592 0,961 0,961 0,961	
HCl	1 Cl 2 H	R(1,2)	1,267	1,268	1,271	1,275
HF	1 H 2 F	R(1,2)	0,899	0,899	0,921	0,920
HPO ₄ ⁻²	1,0 P 2 O 3 O 4 O 5 O 6 H	R(1,2) R(1,3) R(1,4) R(1,5) R(5,6)	1,508 1,496 1,496 1,690 0,938	1,510 1,498 1,498 1,695 0,938	1,540 1,525 1,525 1,729 0,963	1,544 1,529 1,529 1,741 0,962
HSO ₄ ⁻	1 S 2 O 3 O 4 O 5 O 6 H	R(1,2) R(1,3) R(1,4) R(1,5) R(5,6)	1,424 1,416 1,424 1,599 0,942	1,431 1,421 1,421 1,607 0,940		1,464 1,453 1,453 1,665 0,963
LiH	1 Li 2 H	R(1,2)	1,595	1,607	1,585	1,600
NaCl	1 Na 2 Cl	R(1,2)	2,392	2,390		2,397
NaH	1 Na 2 H	R(1,2)	1,913	1,915	1,904	1,912
O ₂	1 O 2 O	R(1,2)	1,158	1,157	1,257	1,252
O ₃	1 O 2 O 3 O	R(1,2) R(2,3)	1,197 1,197	1,196 1,196	1,288 1,288	1,284 1,284
	1,0 P	R(1,2)	1,404	1,405	1,398	1,407

Continuação da tabela						
	2 H	R(1,3)	1,404	1,405	1,398	1,407
	3 H	R(1,4)	1,404	1,405	1,398	1,407
	4 H					
PO_4^{-3}	1,0 P	R(1,2)	1,550	1,553	1,581	1,587
	2 O	R(1,3)	1,550	1,553	1,581	1,587
	3 O	R(1,4)	1,550	1,553	1,581	1,587
	4 O	R(1,5)	1,550	1,553	1,581	1,587
	5 O					
SH_2	1 S	R(1,2)	1,327	1,327	1,320	1,330
	2 H	R(1,3)	1,327	1,327	1,320	1,330
	3 H					
SiH_4	1 Si	R(1,2)	1,475	1,475	1,469	1,474
	2 H	R(1,3)	1,475	1,475	1,469	1,474
	3 H	R(1,4)	1,475	1,475	1,469	1,474
	4 H	R(1,5)	1,475	1,475	1,469	1,474
	5 H					
SiO_2	1 Si	R(1,2)	1,474	1,475	1,522	1,524
	2 O	R(1,3)	1,474	1,475	1,522	1,524
	3 O					
SO_2	1 S	R(1,2)	1,392	1,395	1,444	1,450
	2 O	R(1,3)	1,392	1,395	1,444	1,450
	3 O					
SO_4	1 S	R(1,2)	1,463	1,466	1,495	1,498
	2 O	R(1,3)	1,463	1,466	1,495	1,498
	3 O	R(1,4)	1,463	1,466	1,495	1,498
	4 O	R(1,5)	1,463	1,466	1,495	1,498
	5 O					

Continuação da tabela											
	2 F	A(1,4,3)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
	3 F	A(2,4,3)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
	4 B										
BH ₃	1 H	A(2,1,3)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
	2 H	A(2,1,4)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
	3 H	A(3,1,4)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
	4 B										
C ₂ H ₄ O ₂	1 C	A(2,1,3)	119,8	119,7	120,1	120,0	119,5	119,4	119,9	119,9	119,9
	2 O	A(2,1,5)	125,0	125,0	124,7	124,7	125,2	125,2	124,9	124,9	124,9
	3 O	A(3,1,5)	115,3	115,3	115,2	115,3	115,4	115,3	115,1	115,2	115,2
	4 H	A(1,3,4)	111,1	111,0	111,8	111,7	110,6	110,4	110,7	110,5	110,5
	5 C	A(1,5,6)	110,4	110,4	110,2	110,3	110,6	110,6	110,3	110,4	110,4
	6 H	A(1,5,7)	110,4	110,4	110,2	110,3	110,6	110,6	110,3	110,4	110,4
	7 H	A(1,5,8)	109,4	109,4	109,4	109,4	109,3	109,3	109,5	109,4	109,4
	8 H	A(6,5,7)	108,0	107,9	108,1	108,0	107,9	108,0	108,0	107,9	107,9
C ₃ H ₆ O ₂		A(6,5,8)	109,3	109,3	109,4	109,4	109,2	109,2	109,3	109,3	109,3
		A(7,5,8)	109,3	109,3	109,4	109,4	109,2	109,2	109,3	109,3	109,3
	1 C	A(2,1,3)	119,7	119,7	120,0	120,0	119,4	119,3	120,0	119,9	119,9
	2 O	A(2,1,5)	125,2	125,2	124,9	124,9	125,5	125,5	125,0	125,0	125,0
	3 O	A(3,1,5)	115,1	115,2	115,1	115,1	115,2	115,2	115,0	115,1	115,1
	4 H	A(1,3,4)	111,0	110,9	111,7	111,6	110,4	110,3	110,4	110,3	110,3
	5 C	A(1,5,6)	107,8	107,8	107,7	107,7	107,9	107,9	107,7	107,8	107,8
	6 H	A(1,5,7)	107,8	107,8	107,7	107,7	107,9	107,9	107,7	107,8	107,8
	7 H	A(1,5,8)	113,3	113,3	113,2	113,2	113,5	113,5	113,1	113,1	113,1
	8 C	A(6,5,7)	106,0	106,0	106,1	106,1	105,9	105,9	106,0	105,9	105,9
	9 H	A(6,5,8)	110,8	110,8	110,9	110,9	110,7	110,7	111,0	111,0	111,0

Continuação da tabela												
	10 H	A(7,5,8)	110,8	110,8	110,9	110,9	110,7	110,7	110,7	111,0	111,0	111,0
	11 H	A(5,8,9)	110,9	110,9	110,9	110,9	111,0	111,0	110,9	110,8	110,8	110,8
		A(5,8,10)	110,4	110,4	110,4	110,4	110,3	110,3	110,3	110,6	110,6	110,6
		A(5,8,11)	110,9	110,9	110,9	110,9	111,0	111,0	110,9	110,8	110,8	110,8
		A(9,8,10)	108,5	108,6	108,6	108,6	108,5	108,5	108,5	108,6	108,6	108,6
		A(9,8,11)	107,5	107,5	107,5	107,5	107,5	107,5	107,6	107,4	107,4	107,4
		A(10,8,11)	108,5	108,6	108,6	108,6	108,5	108,5	108,5	108,6	108,6	108,6
C ₄ H ₆	1 C	A(2,1,3)	116,8	116,9	117,0	117,0	116,8	116,8	116,8	117,0	117,0	117,1
	2 H	A(2,1,4)	121,5	121,5	121,4	121,4	121,5	121,5	121,5	121,3	121,3	121,3
	3 H	A(3,1,4)	121,7	121,7	121,6	121,6	121,7	121,7	121,7	121,7	121,7	121,6
	4 C	A(1,4,5)	119,3	119,3	119,5	119,5	119,2	119,2	119,2	119,5	119,5	119,5
	5 H	A(1,4,6)	124,4	124,3	124,1	124,1	124,6	124,6	124,5	124,2	124,2	124,1
	6 C	A(5,4,6)	116,3	116,3	116,4	116,4	116,2	116,2	116,2	116,4	116,4	116,4
	7 H	A(4,6,7)	116,3	116,3	116,4	116,4	116,2	116,2	116,2	116,4	116,4	116,4
	8 C	A(4,6,8)	124,4	124,3	124,1	124,1	124,6	124,6	124,5	124,2	124,2	124,1
	9 H	A(7,6,8)	119,3	119,3	119,5	119,5	119,2	119,2	119,2	119,5	119,5	119,5
	10 H	A(6,8,9)	121,5	121,5	121,4	121,4	121,5	121,5	121,5	121,3	121,3	121,3
		A(6,8,10)	121,7	121,7	121,6	121,6	121,7	121,7	121,7	121,7	121,7	121,6
		A(9,8,10)	116,8	116,9	117,0	117,0	116,8	116,8	116,8	117,0	117,0	117,1
	1 C	A(2,1,3)		119,6	120,0	119,9	119,3	119,3	119,3	119,9	119,9	119,9
	2 O	A(2,1,5)		125,2	125,0	124,9	125,6	125,6	125,6	125,0	125,0	125,0
	3 O	A(3,1,5)		115,2	115,0	115,1	115,1	115,1	115,2	115,1	115,1	115,1
	4 H	A(1,3,4)		110,9	111,6	111,5	110,4	110,4	110,2	110,4	110,4	110,3
	5 C	A(1,5,6)		108,0	107,8	107,9	108,0	108,0	108,0	108,0	108,0	108,0
	6 H	A(1,5,7)		108,0	107,8	107,9	108,0	108,0	108,0	108,0	108,0	108,0
	7 H	A(1,5,8)		113,7	113,6	113,6	113,9	113,9	113,8	113,5	113,5	113,5

Continuação da tabela											
	8 C	A(6,5,7)		105,9	106,1	106,1	106,1	105,8	105,9	105,9	105,9
	9 H	A(6,5,8)		110,4	110,6	110,6	110,6	110,4	110,3	110,6	110,6
	10 H	A(7,5,8)		110,4	110,6	110,6	110,6	110,4	110,3	110,6	110,6
	11 C	A(5,8,9)		108,9	109,0	109,0	109,0	108,9	108,9	108,9	108,8
	12 H	A(5,8,10)		108,9	109,0	109,0	109,0	108,9	108,9	108,9	108,8
	13 H	A(5,8,11)		112,5	112,2	112,2	112,3	112,6	112,6	112,4	112,4
	14 H	A(9,8,10)		105,9	106,0	106,0	105,9	105,9	106,0	105,8	105,7
		A(9,8,11)		110,2	110,3	110,3	110,3	110,1	110,1	110,4	110,4
		A(10,8,11)		110,2	110,3	110,3	110,3	110,1	110,1	110,4	110,4
		A(8,11,12)		111,5	111,4	111,4	111,4	111,6	111,5	111,5	111,5
		A(8,11,13)		110,9	111,0	111,0	110,9	110,9	110,8	111,1	111,1
		A(8,11,14)		111,5	111,4	111,4	111,4	111,6	111,5	111,5	111,5
		A(12,11,13)		107,6	107,6	107,6	107,6	107,5	107,6	107,5	107,5
		A(12,11,14)		107,6	107,6	107,6	107,7	107,6	107,7	107,5	107,5
		A(13,11,14)		107,6	107,6	107,6	107,6	107,5	107,6	107,5	107,5
	1 C	A(2,1,3)	119,7	119,6	119,9	119,9	119,9		119,3	119,9	119,9
	2 O	A(2,1,5)	125,3	125,3	125,0	125,0	125,0		125,7	125,1	125,1
	3 O	A(3,1,5)	115,0	115,1	115,0	115,0	115,1		115,1	115,0	115,0
	4 H	A(1,3,4)	110,9	110,8	111,6	111,6	111,5		110,2	110,4	110,3
	5 C	A(1,5,6)	107,9	107,9	107,8	107,8	107,8		108,0	108,0	107,9
	6 H	A(1,5,7)	107,9	107,9	107,8	107,8	107,8		108,0	108,0	107,9
	7 H	A(1,5,8)	113,9	113,8	113,6	113,6	113,7		114,0	113,6	113,6
	8 C	A(6,5,7)	105,9	105,9	106,1	106,1	106,1		105,9	105,9	105,9
	9 H	A(6,5,8)	110,5	110,5	110,6	110,6	110,6		110,4	110,6	110,6
	10 H	A(7,5,8)	110,5	110,5	110,6	110,6	110,6		110,4	110,6	110,6
	11 C	A(5,8,9)	109,1	109,1	109,1	109,1	109,1		109,0	109,1	109,1

Continuação da tabela

	12 H	A(5,8,10)	109,1	109,1	109,1	109,1	109,0	109,1	109,1
	13 H	A(5,8,11)	112,7	112,6	112,6	112,6	112,8	112,7	112,7
	14 C	A(9,8,10)	105,9	105,9	105,9	105,9	105,9	105,7	105,7
	15 H	A(9,8,11)	109,9	110,0	110,0	110,0	109,9	110,0	110,0
	16 H	A(10,8,11)	109,9	110,0	110,0	110,0	109,9	110,0	110,0
	17 H	A(8,11,12)	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4
		A(8,11,13)	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4
		A(8,11,14)	112,9	112,7	112,7	112,7	113,0	112,7	112,7
		A(12,11,13)	106,1	106,1	106,1	106,1	106,1	106,0	106,0
		A(12,11,14)	109,4	109,5	109,5	109,5	109,4	109,5	109,6
		A(13,11,14)	109,4	109,5	109,5	109,5	109,4	109,5	109,6
		A(11,14,15)	111,1	111,1	111,1	111,1	111,2	111,1	111,1
		A(11,14,16)	111,4	111,4	111,4	111,4	111,3	111,5	111,5
		A(11,14,17)	111,1	111,1	111,1	111,1	111,2	111,1	111,1
		A(15,14,16)	107,7	107,8	107,8	107,8	107,7	107,7	107,7
		A(15,14,17)	107,5	107,6	107,6	107,6	107,6	107,5	107,5
		A(16,14,17)	107,7	107,8	107,8	107,8	107,7	107,7	107,7
1 C	A(2,1,6)						120,3		120,3
2 C	A(2,1,7)						119,6		119,6
3 C	A(6,1,7)						120,1		120,0
4 C	A(1,2,3)						119,6		119,7
5 C	A(1,2,8)						121,1		121,2
6 C	A(3,2,8)						119,3		119,1
7 H	A(2,3,4)						120,4		120,3
8 H	A(2,3,12)						119,8		119,8
9 H	A(4,3,12)						119,8		119,8

[illegible]

Continuação da tabela												
	11 H	A(3,4,10)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
	12 H	A(5,4,10)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
		A(4,5,6)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
		A(4,5,11)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
		A(6,5,11)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
		A(1,6,5)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
		A(1,6,12)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
		A(5,6,12)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
CF ₄	1 C	A(2,1,3)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
	2 F	A(2,1,4)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
	3 F	A(2,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
	4 F	A(3,1,4)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
	5 F	A(3,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
	1 C	A(4,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
CH ₂ F ₂	1 C	A(2,1,3)	113,5	113,5	113,0	113,0	114,0	114,1	113,1	113,1	113,1	113,1
	2 H	A(2,1,4)	108,7	108,7	108,8	108,8	108,5	108,5	108,8	108,8	108,8	108,8
	3 H	A(2,1,5)	108,7	108,7	108,8	108,8	108,5	108,5	108,8	108,8	108,8	108,8
	4 F	A(3,1,4)	108,7	108,7	108,8	108,8	108,5	108,5	108,8	108,8	108,8	108,8
	5 F	A(3,1,5)	108,7	108,7	108,8	108,8	108,5	108,5	108,8	108,8	108,8	108,8
		A(4,1,5)	108,5	108,5	108,4	108,4	108,6	108,6	108,6	108,6	108,6	108,6
CH ₃ F	1 C	A(2,1,3)	110,2	110,2	110,0	110,1	110,4	110,4	109,9	109,9	110,0	110,0
	2 H	A(2,1,4)	110,2	110,2	110,0	110,1	110,4	110,4	109,9	109,9	110,0	110,0
	3 H	A(2,1,5)	108,8	108,7	108,9	108,8	108,5	108,5	109,0	109,0	108,9	108,9
	4 H	A(3,1,4)	110,2	110,2	110,0	110,1	110,4	110,4	109,9	109,9	110,0	110,0
	5 F	A(3,1,5)	108,8	108,7	108,9	108,8	108,5	108,5	109,0	109,0	108,9	108,9

Continuação da tabela											
		A(4,1,5)	108,8	108,7	108,9	108,8	108,5	108,5	108,5	108,9	108,5
CH ₄	1 C	A(2,1,3)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
	2 H	A(2,1,4)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
	3 H	A(2,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
	4 H	A(3,1,4)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
	5 H	A(3,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
CHF ₃	1 C	A(2,1,3)	110,5	110,5	110,5	110,5	110,4	110,4	110,4	110,4	110,4
	2 H	A(2,1,4)	110,5	110,5	110,5	110,5	110,4	110,4	110,4	110,4	110,4
	3 F	A(2,1,5)	110,5	110,5	110,5	110,5	110,4	110,4	110,4	110,4	110,4
	4 F	A(3,1,4)	108,5	108,5	108,5	108,4	108,5	108,5	108,5	108,5	108,5
	5 F	A(3,1,5)	108,5	108,5	108,5	108,4	108,5	108,5	108,5	108,5	108,5
CO	1 O	A(4,1,5)	108,5	108,5	108,5	108,4	108,5	108,5	108,5	108,5	108,5
	2 C		180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0
CO ₂	1 C	L(2,1,3,-2,-1)	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0
	2 O	L(2,1,3,-3,-2)	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0
	3 O										
F ₂	1 F		180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0
	2 F										
H ₂	1 H		180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0
	2 H										
H ₂ CO ₃	1 C	A(2,1,3)	125,6	125,6	125,3	125,4			125,9	125,5	125,5
	2 O	A(2,1,4)	125,6	125,6	125,3	125,4			125,9	125,5	125,5
	3 O	A(3,1,4)	108,7	108,7	109,3	109,2			108,1	109,0	108,9
	4 O	A(1,3,6)	107,1	107,0	107,9	107,7			106,3	106,7	106,5

Continuação da tabela

	5 H 6 H	A(1,4,5)	107,1	107,0	107,9	107,7		106,3	106,7	106,5
H_2PO_4^-	1,0 P	A(2,1,3)	125,2	125,3	124,7	124,8	125,7	125,7	125,2	125,2
	2 O	A(2,1,4)	106,2	106,3	106,1	106,2	106,3	106,4	106,0	106,1
	3 O	A(2,1,5)	106,2	106,3	106,1	106,2	106,3	106,4	106,0	106,2
	4 O	A(3,1,4)	107,6	107,5	107,9	107,8	107,2	107,2	107,7	107,7
	5 O	A(3,1,5)	107,6	107,5	107,9	107,8	107,2	107,2	107,7	107,6
	6 H	A(4,1,5)	101,6	101,5	101,8	101,6	101,5	101,3	101,7	101,6
	7 H	A(1,4,6)	106,6	106,3	107,6	107,3	105,8	105,4	105,3	105,3
		A(1,5,7)	106,6	106,3	107,6	107,3	105,8	105,4	105,3	105,3
H_2SO_4	1 S	A(2,1,3)	123,7	123,8		123,3		124,4		123,7
	2 O	A(2,1,4)	108,0	108,1		107,9		108,3		108,0
	3 O	A(2,1,5)	108,0	108,1		107,9		108,3		108,0
	4 O	A(3,1,4)	106,5	106,4		106,8		105,9		106,5
	5 O	A(3,1,5)	106,5	106,4		106,8		105,9		106,5
	6 H	A(4,1,5)	102,2	101,9		102,1		101,8		102,1
	7 H	A(1,4,6)	109,8	109,4		110,6		108,1		109,0
		A(1,5,7)	109,8	109,4		110,6		108,1		109,0
H_3PO_4	1,0 P	A(2,1,3)	112,5	112,6	112,9	112,8	113,4	112,4	113,8	112,6
	2 O	A(2,1,5)	112,5	112,6	112,9	112,8	118,8	112,4	118,2	112,6
	3 O	A(2,1,6)	112,5	112,6	112,9	112,8	114,6	112,4	114,2	112,6
	4 O	A(3,1,5)	106,3	106,2	105,8	105,9	100,7	106,4	101,1	106,2
	5 O	A(3,1,6)	106,3	106,2	105,8	105,9	106,3	106,4	106,1	106,2
	6 H	A(5,1,6)	106,3	106,2	105,8	105,9	101,2	106,4	101,8	106,2
	7 H	A(1,3,4)	118,3	118,7	120,6	119,9	114,4	117,6	114,8	118,3
	8 H	A(1,5,7)	118,3	118,7	120,6	119,9	113,1	117,6	113,4	118,3

[illegible]

Continuação da tabela								
	3 O							
SO ₂	1 S	A(2,1,3)	119,4	118,9	119,4	118,8	119,4	119,0
	2 O							
	3 O							
SO ₄ ⁻²	1 S	A(2,1,3)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
	2 O	A(2,1,4)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
	3 O	A(2,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
	4 O	A(3,1,4)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
	5 O	A(3,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
		A(4,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5

Tabela 93: Valores de ângulo de ligação para cálculos HF e MP2

Moléculas	Numeração		aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g	aMCG 2d1f	aMCG 3d2f1g
			HF		MP2	
BF_4^-	1 B	A(2,1,3)	109,5	109,5	109,5	109,5
	2 F	A(2,1,4)	109,5	109,5	109,5	109,5
	3 F	A(2,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5
	4 F	A(3,1,4)	109,5	109,5	109,5	109,5
	5 F	A(3,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5
		A(4,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5
BH_4^-	1 B	A(1,5,2)	109,5	109,5	109,5	109,5
	2 H	A(1,5,3)	109,5	109,5	109,5	109,5
	3 H	A(1,5,4)	109,5	109,5	109,5	109,5
	4 H	A(2,5,3)	109,5	109,5	109,5	109,5
	5 H	A(2,5,4)	109,5	109,5	109,5	109,5
		A(3,5,4)	109,5	109,5	109,5	109,5
CO_3^{-2}	1 C	A(2,1,3)	120,0	120,0		120,0
	2 O	A(2,1,4)	120,0	120,0		120,0
	3 O	A(3,1,4)	120,0	120,0		120,0
	4 O					
HCO_2^-	1 C	A(2,1,3)		131,3	132,6	132,5
	2 O	A(2,1,4)		114,0	113,3	113,4
	3 O	A(3,1,4)		114,6	114,1	114,1
	4 O	A(1,4,5)		104,7	100,9	100,9
	5 H					
NO_2^-	1 N	A(2,1,3)	117,4	117,4	116,1	116,2
	2 O					
	3 O					
NO_3^-	1 N	A(2,1,3)	120,0	120,0	120,0	120,0
	2 O	A(2,1,4)	120,0	120,0	120,0	120,0
	3 O	A(3,1,4)	120,0	120,0	120,0	120,0
	4 O					
OH^-	1 O			180,0	180,0	180,0
	2 H					
AlF_2H	1 Al	A(2,1,3)		117,3	117,8	117,9
	2 F	A(2,1,4)		121,4	121,1	121,0
	3 F	A(3,1,4)		121,4	121,1	121,0
	4 H					
AlF_3	1 Al	A(2,1,3)	120,0	120,0	120,0	120,0
	2 F	A(2,1,4)	120,0	120,0	120,0	120,0
	3 F	A(3,1,4)	120,0	120,0	120,0	120,0
	4 F					
AlFH_2	1 Al	A(2,1,3)	117,4	117,4		117,1
	2 F	A(2,1,4)	117,4	117,4		117,1
	3 H	A(3,1,4)	125,2	125,2		125,8
	4 H					
AlH_3	1 Al	A(2,1,3)	120,0	120,0	120,0	120,0
	2 H	A(2,1,4)	120,0	120,0	120,0	120,0
	3 H	A(3,1,4)	120,0	120,0	120,0	120,0
	4 H					
BF_3	1 F	A(1,4,2)	120,0	120,0	120,0	120,0
	2 F	A(1,4,3)	120,0	120,0	120,0	120,0
	3 F	A(2,4,3)	120,0	120,0	120,0	120,0
	4 B					
BH_3	1 H	A(2,1,3)	120,0	120,0	120,0	120,0
	2 H	A(2,1,4)	120,0	120,0	120,0	120,0
	3 H	A(3,1,4)	120,0	120,0	120,0	120,0
	4 B					
	1 C	A(2,1,3)	120,3	120,3	119,7	119,8

Continuação da tabela						
$C_2H_4O_2$	2 O	A(2,1,5)	124,4	124,4	125,2	125,2
	3 O	A(3,1,5)	115,3	115,4	115,1	115,0
	4 H	A(1,3,4)	112,6	112,5	109,7	109,5
	5 C	A(1,5,6)	110,0	110,1	110,1	110,2
	6 H	A(1,5,7)	110,0	110,1	110,1	110,2
	7 H	A(1,5,8)	109,5	109,5	109,4	109,3
	8 H	A(6,5,7)	108,2	108,2	108,2	108,2
		A(6,5,8)	109,6	109,6	109,5	109,5
		A(7,5,8)	109,6	109,6	109,5	109,5
$C_3H_6O_2$	1 C	A(2,1,3)	120,2	120,1	119,8	
	2 O	A(2,1,5)	124,8	124,8	125,2	
	3 O	A(3,1,5)	115,0	115,1	115,1	
	4 H	A(1,3,4)	112,5	112,4	109,5	
	5 C	A(1,5,6)	107,5	107,6	107,7	
	6 H	A(1,5,7)	107,5	107,6	107,7	
	7 H	A(1,5,8)	113,4	113,4	112,6	
	8 C	A(6,5,7)	106,4	106,3	106,5	
	9 H	A(6,5,8)	110,8	110,8	111,1	
	10 H	A(7,5,8)	110,8	110,8	111,1	
	11 H	A(5,8,9)	110,9	110,9	110,7	
		A(5,8,10)	110,0	110,1	110,5	
		A(5,8,11)	110,9	110,9	110,7	
		A(9,8,10)	108,6	108,6	108,7	
		A(9,8,11)	107,8	107,8	107,6	
		A(10,8,11)	108,6	108,6	108,7	
C_4H_6	1 C	A(2,1,3)	116,8		117,6	117,7
	2 H	A(2,1,4)	121,6		120,9	120,9
	3 H	A(3,1,4)	121,5		121,5	121,4
	4 C	A(1,4,5)	119,6		119,5	119,6
	5 H	A(1,4,6)	124,1		123,7	123,5
	6 C	A(5,4,6)	116,3		116,8	116,9
	7 H	A(4,6,7)	116,3		116,8	116,9
	8 C	A(4,6,8)	124,1		123,7	123,5
	9 H	A(7,6,8)	119,6		119,5	119,6
	10 H	A(6,8,9)	121,6		120,9	120,9
		A(6,8,10)	121,5		121,5	121,4
		A(9,8,10)	116,8		117,6	117,7
	1 C	A(2,1,3)	120,1	120,1	119,7	
	2 O	A(2,1,5)	124,9	124,9	125,2	
	3 O	A(3,1,5)	115,0	115,1	115,1	
	4 H	A(1,3,4)	112,5	112,3	109,4	
	5 C	A(1,5,6)	107,6	107,6	107,9	
	6 H	A(1,5,7)	107,6	107,6	107,9	
	7 H	A(1,5,8)	113,8	113,8	113,3	
	8 C	A(6,5,7)	106,3	106,3	106,4	
	9 H	A(6,5,8)	110,6	110,6	110,5	
	10 H	A(7,5,8)	110,6	110,6	110,5	
	11 C	A(5,8,9)	109,0	109,0	108,9	
	12 H	A(5,8,10)	109,0	109,0	108,9	
	13 H	A(5,8,11)	112,2	112,2	111,7	
	14 H	A(9,8,10)	106,2	106,2	106,2	
		A(9,8,11)	110,1	110,1	110,5	
		A(10,8,11)	110,1	110,1	110,5	
		A(8,11,12)	111,4	111,4	111,2	
		A(8,11,13)	110,8	110,7	111,1	
		A(8,11,14)	111,4	111,4	111,1	
		A(12,11,13)	107,7	107,7	107,7	
		A(12,11,14)	107,8	107,8	107,7	

Continuação da tabela						
		A(13,11,14)	107,7	107,7	107,7	
$C_5H_{10}O_2$	1 C	A(2,1,3)	120,1	120,0		
	2 O	A(2,1,5)	125,0	124,9		
	3 O	A(3,1,5)	114,9	115,0		
	4 H	A(1,3,4)	112,5	112,3		
	5 C	A(1,5,6)	107,6	107,6		
	6 H	A(1,5,7)	107,6	107,6		
	7 H	A(1,5,8)	113,8	113,8		
	8 C	A(6,5,7)	106,3	106,3		
	9 H	A(6,5,8)	110,6	110,7		
	10 H	A(7,5,8)	110,6	110,7		
	11 C	A(5,8,9)	109,1	109,1		
	12 H	A(5,8,10)	109,1	109,1		
	13 H	A(5,8,11)	112,4	112,5		
	14 C	A(9,8,10)	106,2	106,2		
	15 H	A(9,8,11)	109,9	109,9		
	16 H	A(10,8,11)	109,9	109,9		
	17 H	A(8,11,12)	109,5	109,5		
		A(8,11,13)	109,5	109,5		
		A(8,11,14)	112,7	112,7		
		A(12,11,13)	106,3	106,3		
		A(12,11,14)	109,3	109,3		
		A(13,11,14)	109,3	109,3		
		A(11,14,15)	111,1	111,1		
		A(11,14,16)	111,1	111,1		
		A(11,14,17)	111,1	111,1		
		A(15,14,16)	107,8	107,8		
		A(15,14,17)	107,7	107,7		
		A(16,14,17)	107,8	107,8		
$C_6H_5OCH_3$	1 C	A(2,1,6)	120,4	120,4		
	2 C	A(2,1,7)	119,6	119,6		
	3 C	A(6,1,7)	120,0	120,0		
	4 C	A(1,2,3)	119,8	119,7		
	5 C	A(1,2,8)	120,9	120,9		
	6 C	A(3,2,8)	119,3	119,3		
	7 H	A(2,3,4)	120,2	120,2		
	8 H	A(2,3,12)	119,9	119,9		
	9 H	A(4,3,12)	119,9	119,9		
	10 H	A(3,4,5)	119,8	119,7		
	11 H	A(3,4,9)	119,3	119,3		
	12 O	A(5,4,9)	120,9	120,9		
	13 C	A(4,5,6)	120,4	120,4		
	14 H	A(4,5,10)	119,6	119,6		
	15 H	A(6,5,10)	120,0	120,0		
	16 H	A(1,6,5)	119,5	119,5		
		A(1,6,11)	120,2	120,2		
		A(5,6,11)	120,2	120,2		
		A(3,12,13)	116,1	116,1		
		A(12,13,14)	111,1	111,1		
		A(12,13,15)	107,0	107,0		
		A(12,13,16)	111,1	111,1		
		A(14,13,15)	109,3	109,3		
		A(14,13,16)	108,9	108,9		
		A(15,13,16)	109,3	109,3		
	1 C	A(2,1,6)	120,0	120,0	120,0	
	2 C	A(2,1,7)	120,0	120,0	120,0	
	3 C	A(6,1,7)	120,0	120,0	120,0	
	4 C	A(1,2,3)	120,0	120,0	120,0	
	5 C	A(1,2,8)	120,0	120,0	120,0	

Continuação da tabela						
C ₆ H ₆	6 C	A(3,2,8)	120,0	120,0	120,0	
	7 H	A(2,3,4)	120,0	120,0	120,0	
	8 H	A(2,3,9)	120,0	120,0	120,0	
	9 H	A(4,3,9)	120,0	120,0	120,0	
	10 H	A(3,4,5)	120,0	120,0	120,0	
	11 H	A(3,4,10)	120,0	120,0	120,0	
	12 H	A(5,4,10)	120,0	120,0	120,0	
		A(4,5,6)	120,0	120,0	120,0	
		A(4,5,11)	120,0	120,0	120,0	
		A(6,5,11)	120,0	120,0	120,0	
		A(1,6,5)	120,0	120,0	120,0	
		A(1,6,12)	120,0	120,0	120,0	
		A(5,6,12)	120,0	120,0	120,0	
CF ₄	1 C	A(2,1,3)	109,5	109,5	109,5	109,5
	2 F	A(2,1,4)	109,5	109,5	109,5	109,5
	3 F	A(2,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5
	4 F	A(3,1,4)	109,5	109,5	109,5	109,5
	5 F	A(3,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5
		A(4,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5
CH ₂ F ₂	1 C	A(2,1,3)	112,7	112,7	113,5	113,7
	2 H	A(2,1,4)	108,9	108,9	108,7	108,7
	3 H	A(2,1,5)	108,9	108,9	108,7	108,7
	4 F	A(3,1,4)	108,9	108,9	108,7	108,7
	5 F	A(3,1,5)	108,9	108,9	108,7	108,7
		A(4,1,5)	108,3	108,2	108,5	108,4
CH ₃ F	1 C	A(2,1,3)	110,0	110,0	110,2	110,3
	2 H	A(2,1,4)	110,0	110,0	110,2	110,3
	3 H	A(2,1,5)	108,9	108,9	108,8	108,7
	4 H	A(3,1,4)	110,0	110,0	110,2	110,3
	5 F	A(3,1,5)	108,9	108,9	108,8	108,7
		A(4,1,5)	108,9	108,9	108,8	108,7
CH ₄	1 C	A(2,1,3)	109,5	109,5	109,5	109,5
	2 H	A(2,1,4)	109,5	109,5	109,5	109,5
	3 H	A(2,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5
	4 H	A(3,1,4)	109,5	109,5	109,5	109,5
	5 H	A(3,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5
		A(4,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5
CHF ₃	1 C	A(2,1,3)	110,5	110,5	110,5	110,5
	2 H	A(2,1,4)	110,5	110,5	110,5	110,5
	3 F	A(2,1,5)	110,5	110,5	110,5	110,5
	4 F	A(3,1,4)	108,5	108,5	108,5	108,4
	5 F	A(3,1,5)	108,5	108,5	108,5	108,4
		A(4,1,5)	108,5	108,5	108,5	108,4
CO	1 O		180,0	180,0	180,0	180,0
	2 C					
CO ₂	1 C	L(2,1,3,-2,-1)	180,0	180,0	180,0	180,0
	2 O	L(2,1,3,-3,-2)	180,0	180,0	180,0	180,0
	3 O					
F ₂	1 F		180,0	180,0	180,0	180,0
	2 F					
H ₂	1 H		180,0	180,0	180,0	180,0
	2 H					
H ₂ CO ₃	1 C	A(2,1,3)	125,1	125,1		125,9
	2 O	A(2,1,4)	125,1	125,1		125,9
	3 O	A(3,1,4)	109,8	109,7		108,3
	4 O	A(1,3,6)	108,6	108,6		105,6
	5 H	A(1,4,5)	108,6	108,6		105,6
	6 H					

Continuação da tabela						
H_2PO_4^-	1,0 P	A(2,1,3)	124,2	124,2		
	2 O	A(2,1,4)	106,3	106,4		
	3 O	A(2,1,5)	106,3	106,4		
	4 O	A(3,1,4)	108,1	108,0		
	5 O	A(3,1,5)	108,1	108,0		
	6 H	A(4,1,5)	101,8	101,7		
	7 H	A(1,4,6)	108,6	108,6		
		A(1,5,7)	108,6	108,7		
H_2SO_4	1 S	A(2,1,3)	122,5	122,6	123,8	
	2 O	A(2,1,4)	107,8	107,9	107,9	
	3 O	A(2,1,5)	107,8	107,9	107,9	
	4 O	A(3,1,4)	107,3	107,2	106,5	
	5 O	A(3,1,5)	107,3	107,2	106,4	
	6 H	A(4,1,5)	102,4	102,3	102,5	
	7 H	A(1,4,6)	112,0	111,8	108,7	
		A(1,5,7)	112,0	111,8	108,7	
H_3PO_4	1,0 P	A(2,1,3)		113,0	113,7	
	2 O	A(2,1,5)		113,0	118,6	
	3 O	A(2,1,6)		113,0	114,3	
	4 O	A(3,1,5)		105,7	100,8	
	5 O	A(3,1,6)		105,7	106,3	
	6 H	A(5,1,6)		105,7	101,4	
	7 H	A(1,3,4)		120,7	113,6	
	8 H	A(1,5,7)		120,7	112,6	
		A(1,6,8)		120,7	110,2	
HCl	1 Cl		180,0	180,0	180,0	180,0
	2 H					
HF	1 H		180,0	180,0	180,0	180,0
	2 F					
HPO_4^{2-}	1,0 P	A(2,1,3)	115,0	115,0	115,3	115,3
	2 O	A(2,1,4)	100,4	115,0	99,6	115,3
	3 O	A(2,1,5)	115,0	100,5	115,3	99,6
	4 O	A(3,1,4)	104,7	114,6	104,6	114,9
	5 O	A(3,1,5)	114,7	104,7	114,9	104,5
	6 H	A(4,1,5)	104,7	104,7	104,6	104,5
		A(1,5,6)	102,8	102,9	97,9	98,1
HSO_4^{2-}	1 S	A(2,1,3)	115,0	114,5		115,0
	2 O	A(2,1,4)	113,3	114,5		114,9
	3 O	A(2,1,5)	104,5	102,5		101,9
	4 O	A(3,1,4)	115,0	114,2		114,6
	5 O	A(3,1,5)	102,7	104,6		103,9
	6 H	A(4,1,5)	104,5	104,6		104,1
		A(1,5,6)	108,1	106,8		102,3
LiH	1 Li		180,0	180,0	180,0	180,0
	2 H					
NaCl	1 Na		180,0	180,0	180,0	180,0
	2 Cl					
NaH	1 Na		180,0	180,0	180,0	180,0
	2 H					
O_2	1 O		180,0	180,0	180,0	180,0
	2 O					
O_3	1 O	A(1,2,3)	119,3	119,3	116,6	116,7
	2 O					
	3 O					
PH_3	1,0 P	A(2,1,3)	95,7	95,6	93,9	93,6
	2 H	A(2,1,4)	95,7	95,6	93,9	93,6
	3 H	A(3,1,4)	95,7	95,6	93,9	93,6
	4 H					

Continuação da tabela						
PO_4^{-3}	1,0 P	A(2,1,3)	109,5	109,5		109,5
	2 O	A(2,1,4)	109,5	109,5		109,5
	3 O	A(2,1,5)	109,5	109,5		109,5
	4 O	A(3,1,4)	109,5	109,5		109,5
	5 O	A(3,1,5)	109,5	109,5		109,5
		A(4,1,5)	109,5	109,5		109,5
SH_2	1 S	A(2,1,3)	94,0	94,2	91,3	92,2
	2 H					
	3 H					
SiH_4	1 Si	A(2,1,3)	109,5	109,5	109,5	109,5
	2 H	A(2,1,4)	109,5	109,5	109,5	109,5
	3 H	A(2,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5
	4 H	A(3,1,4)	109,5	109,5	109,5	109,5
	5 H	A(3,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5
		A(4,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5
SiO_2	1 Si	L(2,1,3,-1,-1)	180,0	180,0	180,0	180,0
	2 O	L(2,1,3,-2,-2)	180,0	180,0	180,0	180,0
	3 O					
SO_2	1 S	A(2,1,3)	119,3	118,7	119,6	119,4
	2 O					
	3 O					
SO_4^{-2}	1 S	A(2,1,3)	109,5	109,5	109,5	109,5
	2 O	A(2,1,4)	109,5	109,5	109,5	109,5
	3 O	A(2,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5
	4 O	A(3,1,4)	109,5	109,5	109,5	109,5
	5 O	A(3,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5
		A(4,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5

Continuação da tabela										
	10 H 11 H	R(8,11)	1,089	1,090	1,088	1,100	1,097	1,089	1,089	1,088
C ₄ H ₆	1 C	R(1,2)	1,084	1,084	1,083			1,083	1,083	1,083
	2 H	R(1,3)	1,082	1,082	1,081			1,081	1,081	1,080
	3 H	R(1,4)	1,341	1,342	1,334			1,334	1,334	1,334
	4 C	R(4,5)	1,087	1,087	1,086			1,086	1,086	1,085
	5 H	R(4,6)	1,459	1,460	1,453			1,453	1,453	1,452
	6 C	R(6,7)	1,087	1,087	1,086			1,086	1,086	1,085
	7 H	R(6,8)	1,341	1,342	1,334			1,334	1,334	1,334
	8 C	R(8,9)	1,084	1,084	1,083			1,083	1,083	1,083
	9 H	R(8,10)	1,082	1,082	1,081			1,081	1,081	1,080
	10 H									
C ₄ H ₈ O ₂	1 C	R(1,2)	1,222	1,222	1,196	1,203	1,205	1,197	1,197	1,195
	2 O	R(1,3)	1,393	1,394	1,363	1,363	1,368	1,363	1,364	1,362
	3 O	R(1,5)	1,514	1,514	1,519	1,522	1,520	1,518	1,518	1,518
	4 H	R(3,4)	0,974	0,975	0,964	0,970	0,967	0,964	0,964	0,963
	5 C	R(5,6)	1,097	1,097	1,095	1,107	1,103	1,096	1,096	1,095
	6 H	R(5,7)	1,097	1,097	1,095	1,107	1,103	1,096	1,096	1,095
	7 H	R(5,8)	1,534	1,535	1,526	1,529	1,530	1,525	1,526	1,525
	8 C	R(8,9)	1,092	1,092	1,090	1,102	1,098	1,091	1,091	1,090
	9 H	R(8,10)	1,092	1,092	1,090	1,102	1,098	1,091	1,091	1,090
	10 H	R(8,11)	1,534	1,535	1,528	1,529	1,531	1,527	1,527	1,527
	11 C	R(11,12)	1,093	1,093	1,092	1,104	1,100	1,092	1,092	1,091
	12 H	R(11,13)	1,091	1,091	1,090	1,101	1,098	1,090	1,090	1,089
	13 H	R(11,14)	1,093	1,093	1,092	1,104	1,100	1,092	1,092	1,091
	14 H									
C ₅ H ₁₀ O ₂	1 C	R(1,2)	1,222	1,222	1,196	1,203	1,204	1,197	1,197	1,195
	2 O	R(1,3)	1,393	1,394	1,363	1,364	1,369	1,363	1,364	1,363
	3 O	R(1,5)	1,514	1,514	1,519	1,522	1,520	1,518	1,518	1,518
	4 H	R(3,4)	0,975	0,975	0,964	0,970	0,967	0,964	0,964	0,963
	5 C	R(5,6)	1,097	1,097	1,095	1,107	1,103	1,096	1,095	1,095
	6 H	R(5,7)	1,097	1,097	1,095	1,107	1,103	1,096	1,095	1,095
	7 H	R(5,8)	1,533	1,534	1,526	1,528	1,529	1,525	1,525	1,525
	8 C	R(8,9)	1,093	1,093	1,091	1,103	1,099	1,092	1,092	1,091
	9 H	R(8,10)	1,093	1,093	1,091	1,103	1,099	1,092	1,092	1,091
	10 H	R(8,11)	1,537	1,538	1,529	1,531	1,533	1,529	1,529	1,529
	11 C	R(11,12)	1,096	1,096	1,094	1,106	1,102	1,095	1,095	1,094

Continuação da tabela											
	12 H	R(11,13)	1,096	1,096	1,096	1,094	1,106	1,102	1,095	1,095	1,094
	13 H	R(11,14)	1,536	1,536	1,536	1,528	1,530	1,531	1,528	1,528	1,527
	14 C	R(14,15)	1,093	1,093	1,093	1,091	1,103	1,100	1,092	1,092	1,091
	15 H	R(14,16)	1,092	1,092	1,092	1,090	1,102	1,099	1,091	1,091	1,090
	16 H	R(14,17)	1,093	1,093	1,093	1,091	1,103	1,100	1,092	1,092	1,091
	17 H										
C ₆ H ₅ OCH ₃	1 C	R(1,2)	1,398			1,390					1,390
	2 C	R(1,6)	1,399			1,391					1,390
	3 C	R(1,7)	1,082			1,082					1,081
	4 C	R(2,3)	1,396			1,392					1,391
	5 C	R(2,8)	1,081			1,081					1,081
	6 C	R(3,4)	1,396			1,392					1,391
	7 H	R(3,12)	1,409			1,379					1,378
	8 H	R(4,5)	1,398			1,390					1,390
	9 H	R(4,9)	1,081			1,081					1,081
	10 H	R(5,6)	1,399			1,391					1,390
	11 H	R(5,10)	1,082			1,082					1,081
	12 O	R(6,11)	1,082			1,081					1,081
	13 C	R(12,13)	1,463			1,425					1,424
	14 H	R(13,14)	1,093			1,093					1,093
	15 H	R(13,15)	1,086			1,087					1,087
	16 H	R(13,16)	1,093			1,093					1,093
C ₆ H ₆	1 C	R(1,2)	1,398	1,399	1,399	1,391	1,399	1,399	1,391	1,391	1,391
	2 C	R(1,6)	1,398	1,399	1,399	1,391	1,399	1,399	1,391	1,391	1,391
	3 C	R(1,7)	1,082	1,082	1,082	1,082	1,093	1,091	1,082	1,082	1,081
	4 C	R(2,3)	1,398	1,399	1,399	1,391	1,399	1,399	1,391	1,391	1,391
	5 C	R(2,8)	1,082	1,082	1,082	1,082	1,093	1,091	1,082	1,082	1,081
	6 C	R(3,4)	1,398	1,399	1,399	1,391	1,399	1,399	1,391	1,391	1,391
	7 H	R(3,9)	1,082	1,082	1,082	1,082	1,093	1,091	1,082	1,082	1,081
	8 H	R(4,5)	1,398	1,399	1,399	1,391	1,399	1,399	1,391	1,391	1,391
	9 H	R(4,10)	1,082	1,082	1,082	1,082	1,093	1,091	1,082	1,082	1,081
	10 H	R(5,6)	1,398	1,399	1,399	1,391	1,399	1,399	1,391	1,391	1,391
	11 H	R(5,11)	1,082	1,082	1,082	1,082	1,093	1,091	1,082	1,082	1,081
	12 H	R(6,12)	1,082	1,082	1,082	1,082	1,093	1,091	1,082	1,082	1,081
CF ₄	1 C	R(1,2)	1,371	1,373	1,373	1,326	1,329	1,334	1,326	1,327	1,325
	2 F	R(1,3)	1,371	1,373	1,373	1,326	1,329	1,334	1,326	1,327	1,325
	3 F	R(1,4)	1,371	1,373	1,373	1,326	1,329	1,334	1,326	1,327	1,325

Continuação da tabela												
H_2PO_4^-	1,0 P	R(1,2)	1,595	1,605	1,501	1,532	1,537	1,507	1,509	1,496		
	2 O	R(1,3)	1,581	1,584	1,482	1,512	1,516	1,488	1,490	1,478		
	3 O	R(1,4)	1,759	1,761	0,961	1,703	1,700	1,669	1,668	1,656		
	4 O	R(1,5)	1,796	1,797	1,660	1,703	1,700	1,669	1,668	1,656		
	5 O	R(4,6)	0,973	0,974	0,961	0,970	0,966	0,962	0,962	0,960		
	6 H	R(5,7)	0,974	0,975	1,660	0,970	0,966	0,962	0,962	0,960		
	7 H											
H_2SO_4	1 S	R(1,2)			1,433					1,428		
	2 O	R(1,3)			1,417					1,412		
	3 O	R(1,4)			1,597					1,592		
	4 O	R(1,5)			1,597					1,592		
	5 O	R(4,6)			0,967					0,966		
	6 H	R(5,7)			0,967					0,966		
	7 H											
H_3PO_4	1,0 P	R(1,2)		1,559	1,460	1,488		1,466	1,467	1,455		
	2 O	R(1,3)		1,681	1,587	1,626		1,595	1,595	1,583		
	3 O	R(1,5)		1,694	1,596	1,635		1,603	1,604	1,591		
	4 O	R(1,6)		1,710	1,606	1,644		1,613	1,614	1,601		
	5 O	R(3,4)		0,975	0,963	0,972		0,964	0,964	0,963		
	6 H	R(5,7)		0,972	0,963	0,971		0,964	0,964	0,962		
	7 H	R(6,8)		0,974	0,964	0,972		0,964	0,965	0,963		
	8 H											
HCl	1 Cl	R(1,2)			1,282					1,281		
	2 H											
HF	1 H	R(1,2)	0,940	0,942	0,923	0,927	0,926	0,922	0,924	0,922		
	2 F											
HPO_4^{2-}	1,0 P	R(1,2)	1,646		1,541	1,576	1,580	1,547	1,550	1,538		
	2 O	R(1,3)	1,627		1,527	1,558	1,565	1,531	1,536	1,523		
	3 O	R(1,4)	1,880		1,759	1,817	1,803	1,775	1,765	1,754		
	4 O	R(1,5)	1,627		1,527	1,558	1,565	1,531	1,536	1,523		
	5 O	R(5,6)	0,979		0,961	0,972	0,966	0,962	0,962	0,960		
	6 H											
HSO_4^-	1 S	R(1,2)	1,649			1,506			1,477			
	2 O	R(1,3)	1,629			1,493			1,466			
	3 O	R(1,4)	1,629			1,493			1,466			
	4 O	R(1,5)	1,888			1,734			1,695			
	5 O	R(5,6)	0,983			0,971			0,963			

Continuação da tabela											
	6 H										
LiH	1 Li	R(1,2)	1,594	1,594	1,585	1,604	1,601	1,590	1,590	1,590	1,590
	2 H										
NaCl	1 Na	R(1,2)	2,424	2,421	2,371	2,375	2,385	2,381	2,380	2,372	2,372
	2 Cl										
NaH	1 Na	R(1,2)	1,890	1,890	1,879	1,885	1,878	1,885	1,883		
	2 H										
O ₂	1 O	R(1,2)	1,258		1,204	1,210	1,208	1,206	1,205	1,203	1,203
	2 O										
O ₃	1 O	R(1,2)	1,319	1,318	1,253	1,260	1,257	1,256	1,255	1,252	1,252
	2 O	R(2,3)	1,319	1,318	1,253	1,260	1,257	1,256	1,255	1,252	1,252
	3 O										
PH ₃	1,0 P	R(1,2)	1,448	1,448	1,419	1,435	1,434	1,421	1,421	1,417	1,417
	2 H	R(1,3)	1,448	1,448	1,419	1,435	1,434	1,421	1,421	1,417	1,417
	3 H	R(1,4)	1,448	1,448	1,419	1,435	1,434	1,421	1,421	1,418	1,418
	4 H										
PO ₄ ⁻³	1,0 P	R(1,2)	1,689	1,712	1,586	1,623	1,628	1,591	1,594	1,583	1,583
	2 O	R(1,3)	1,689	1,712	1,586	1,623	1,628	1,591	1,594	1,583	1,583
	3 O	R(1,4)	1,689	1,712	1,586	1,623	1,628	1,591	1,594	1,583	1,583
	4 O	R(1,5)	1,689	1,712	1,586	1,623	1,628	1,591	1,594	1,583	1,583
	5 O										
SH ₂	1 S	R(1,2)	1,384	1,384	1,342	1,358	1,356	1,345	1,345	1,341	1,341
	2 H	R(1,3)	1,384	1,384	1,342	1,358	1,356	1,345	1,345	1,341	1,341
	3 H										
SiH ₄	1 Si	R(1,2)	1,494	1,494	1,479	1,495	1,494	1,482	1,482	1,478	1,478
	2 H	R(1,3)	1,494	1,494	1,479	1,495	1,494	1,482	1,482	1,478	1,478
	3 H	R(1,4)	1,494	1,494	1,479	1,495	1,494	1,482	1,482	1,478	1,478
	4 H	R(1,5)	1,494	1,494	1,479	1,495	1,494	1,482	1,482	1,478	1,478
	5 H										
SiO ₂	1 Si	R(1,2)	1,580	1,586	1,510	1,539	1,542	1,516	1,517	1,507	1,507
	2 O	R(1,3)	1,580	1,586	1,510	1,539	1,542	1,516	1,517	1,507	1,507
	3 O										
SO ₂	1 S	R(1,2)	1,604	1,607	1,440	1,481	1,484	1,451	1,451	1,434	1,434
	2 O	R(1,3)	1,604	1,607	1,440	1,481	1,484	1,451	1,451	1,434	1,434
	3 O										
SO ₄ ⁻²	1 S	R(1,2)	1,683	1,703		1,545	1,551	1,512	1,516	1,500	1,500
	2 O	R(1,3)	1,683	1,703		1,545	1,551	1,512	1,516	1,500	1,500

Tabela 95: Valores de ângulo de ligação otimizados com o funcional B3LYP

Moléculas	Numeração		B3LYP							
			6-311G	6-311G+	MCG	cc-pVDZ	aug cc-pVDZ	cc-pVTZ	aug cc-pVTZ	pc-3
BF ₄ ⁻	1 B	A(2,1,3)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
	2 F	A(2,1,4)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
	3 F	A(2,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
	4 F	A(3,1,4)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
	5 F	A(3,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
BH ₄ ⁻		A(4,1,5)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
	1 B	A(1,5,2)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
	2 H	A(1,5,3)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
	3 H	A(1,5,4)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
	4 H	A(2,5,3)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
CO ₃ ⁻²	5 H	A(2,5,4)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
		A(3,5,4)	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
	1 C	A(2,1,3)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
	2 O	A(2,1,4)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
	3 O	A(3,1,4)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
HCO ₂ ⁻	4 O									
	1 C	A(2,1,3)	133,0	132,8	132,6	132,9	132,4	132,8	132,5	132,5
	2 O	A(2,1,4)	112,9	113,3	113,4	113,0	113,6	113,2	113,5	113,5
	3 O	A(3,1,4)	114,0	114,0	114,0	114,1	114,0	114,0	114,0	114,0
	4 O	A(1,4,5)	103,8	105,2	102,3	99,9	102,4	101,4	102,4	102,4
NO ₂ ⁻	5 H									
	1 N	A(2,1,3)	115,7	116,2	116,4	115,9	116,6	116,2	116,9	116,5
	2 O									
NO ₃ ⁻	3 O									
	1 N	A(2,1,3)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
	2 O	A(2,1,4)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
	3 O	A(3,1,4)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
OH ⁻	4 O									
	1 O		180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0
AlF ₂ H	2 H									
	1 Al	A(2,1,3)	116,6		117,9	117,6	117,3	117,6	117,5	117,9
	2 F	A(2,1,4)	121,7		121,1	121,2	121,4	121,2	121,2	121,0
	3 F	A(3,1,4)	121,7		121,1	121,2	121,4	121,2	121,2	121,0

Continuação da tabela												
	4 H											
AlF ₃	1 Al	A(2,1,3)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
	2 F	A(2,1,4)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
	3 F	A(3,1,4)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
	4 F											
AlFH ₂	1 Al	A(2,1,3)	116,3	115,9	117,0				116,8	116,8	117,0	117,0
	2 F	A(2,1,4)	116,3	115,9	117,0				116,8	116,8	117,0	117,0
	3 H	A(3,1,4)	127,4	128,1	126,0				126,3	126,4	126,0	126,0
	4 H											
AlH ₃	1 Al	A(2,1,3)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
	2 H	A(2,1,4)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
	3 H	A(3,1,4)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
	4 H											
BF ₃	1 F	A(1,4,2)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
	2 F	A(1,4,3)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
	3 F	A(2,4,3)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
	4 B											
BH ₃	1 H	A(2,1,3)	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
	2 H	A(2,1,4)	120,0	120,0	1200,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
	3 H	A(3,1,4)	120,0	120,0	1200,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0
	4 B											
C ₂ H ₄ O ₂	1 C	A(2,1,3)	119,1	118,8	119,8	119,8	119,4	119,9	119,7	119,9	119,8	119,8
	2 O	A(2,1,5)	125,4	125,3	124,9	124,9	124,9	124,9	125,0	125,0	124,9	124,9
	3 O	A(3,1,5)	115,5	115,9	115,3	115,3	115,7	115,2	115,3	115,3	115,3	115,3
	4 H	A(1,3,4)	113,5	114,0	110,9	109,7	110,8	110,6	110,9	110,9	111,0	111,0
	5 C	A(1,5,6)	110,9	110,9	110,4	110,6	110,5	110,5	110,5	110,5	110,5	110,5
	6 H	A(1,5,7)	110,9	110,9	110,4	110,6	110,5	110,5	110,5	110,5	110,5	110,5
	7 H	A(1,5,8)	109,3	109,2	109,4	109,4	109,1	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4
	8 H	A(6,5,7)	107,9	108,1	107,9	107,7	108,0	107,9	107,9	107,9	107,9	107,9
		A(6,5,8)	108,9	108,8	109,3	109,3	109,3	109,3	109,3	109,3	109,3	109,3
		A(7,5,8)	108,9	108,8	109,3	109,3	109,3	109,3	109,3	109,3	109,3	109,3
	1 C	A(2,1,3)	119,1	118,8	119,7	119,9	119,4	119,8	119,6	119,7	119,7	119,7
	2 O	A(2,1,5)	125,6	125,6	125,2	124,7	125,1	125,1	125,2	125,1	125,1	125,1
C ₃ H ₆ O ₂	3 O	A(3,1,5)	115,3	115,6	115,1	115,4	115,5	115,1	115,2	115,2	115,2	115,2
	4 H	A(1,3,4)	113,3	113,8	110,7	109,6	110,6	110,4	110,7	110,7	110,8	110,8
	5 C	A(1,5,6)	108,2	108,2	107,8	107,9	107,9	107,9	107,8	107,8	107,8	107,8
	6 H	A(1,5,7)	108,2	108,2	107,8	107,9	107,9	107,9	107,8	107,8	107,8	107,8

C₃H₆O₂

Continuação da tabela												
	7 H	A(1,5,8)	113,2	113,2	113,3	112,9	113,3	113,2	113,3	113,3	113,3	113,3
	8 C	A(6,5,7)	106,0	106,2	106,0	105,8	106,1	106,0	106,0	106,0	106,0	106,0
	9 H	A(6,5,8)	110,5	110,4	110,8	111,0	110,7	110,8	110,8	110,8	110,8	110,8
	10 H	A(7,5,8)	110,5	110,4	110,8	111,0	110,7	110,8	110,8	110,8	110,8	110,8
	11 H	A(5,8,9)	110,9	111,0	110,9	110,8	110,9	110,9	110,9	110,9	110,9	110,9
		A(5,8,10)	110,5	110,3	110,4	110,7	110,2	110,5	110,4	110,4	110,4	110,4
		A(5,8,11)	110,9	111,0	110,9	110,8	110,9	110,9	110,9	110,9	110,9	110,9
		A(9,8,10)	108,5	108,5	108,5	108,6	108,6	108,5	108,5	108,5	108,5	108,5
		A(9,8,11)	107,4	107,5	107,5	107,3	107,6	107,5	107,5	107,5	107,5	107,5
		A(10,8,11)	108,5	108,5	108,5	108,6	108,6	108,5	108,5	108,5	108,5	108,5
C ₄ H ₆	1 C	A(2,1,3)	116,5	116,5	116,9			116,9	116,9	116,9	116,9	116,9
	2 H	A(2,1,4)	121,6	121,7	121,4			121,4	121,4	121,4	121,4	121,4
	3 H	A(3,1,4)	121,9	121,8	121,7			121,7	121,7	121,7	121,7	121,7
	4 C	A(1,4,5)	119,4	119,3	119,4			119,4	119,4	119,3	119,4	119,4
	5 H	A(1,4,6)	124,5	124,5	124,3			124,3	124,3	124,3	124,3	124,3
	6 C	A(5,4,6)	116,1	116,1	116,3			116,3	116,3	116,3	116,3	116,3
	7 H	A(4,6,7)	116,1	116,1	116,3			116,3	116,3	116,3	116,3	116,3
	8 C	A(4,6,8)	124,5	124,5	124,3			124,3	124,3	124,3	124,3	124,3
	9 H	A(7,6,8)	119,4	119,3	119,4			119,4	119,4	119,3	119,4	119,4
	10 H	A(6,8,9)	121,6	121,7	121,4			121,4	121,4	121,4	121,4	121,4
		A(6,8,10)	121,9	121,8	121,7			121,7	121,7	121,7	121,7	121,7
		A(9,8,10)	116,5	116,5	116,9			116,9	116,9	116,9	116,9	116,9
	1 C	A(2,1,3)	119,0	118,7	119,7	119,8	119,3	119,8	119,6	119,6	119,6	119,6
	2 O	A(2,1,5)	125,7	125,7	125,3	124,8	125,2	125,2	125,3	125,3	125,3	125,3
C ₄ H ₈ O ₂	3 O	A(3,1,5)	115,3	115,6	115,1	115,4	115,5	115,1	115,1	115,1	115,1	115,1
	4 H	A(1,3,4)	113,2	113,8	110,7	109,6	110,6	110,4	110,7	110,7	110,8	110,8
	5 C	A(1,5,6)	108,4	108,4	108,0	108,1	108,0	108,0	108,0	108,0	108,0	108,0
	6 H	A(1,5,7)	108,4	108,4	108,0	108,1	108,0	108,0	108,0	108,0	108,0	108,0
	7 H	A(1,5,8)	113,5	113,6	113,8	113,3	113,7	113,7	113,8	113,8	113,8	113,8
	8 C	A(6,5,7)	106,0	106,2	105,9	105,7	106,0	105,9	105,9	105,9	105,9	105,9
	9 H	A(6,5,8)	110,1	110,0	110,4	110,7	110,4	110,5	110,4	110,4	110,4	110,4
	10 H	A(7,5,8)	110,1	110,0	110,4	110,7	110,4	110,5	110,4	110,4	110,4	110,4
	11 C	A(5,8,9)	108,9	109,0	108,9	108,7	108,9	108,9	108,9	108,9	108,9	108,9
	12 H	A(5,8,10)	108,9	109,0	108,9	108,7	108,9	108,9	108,9	108,9	108,9	108,9
	13 H	A(5,8,11)	112,5	112,3	112,4	112,7	112,4	112,5	112,4	112,4	112,4	112,4
	14 H	A(9,8,10)	105,8	105,9	105,9	105,6	106,0	105,9	105,9	105,9	105,9	105,9
		A(9,8,11)	110,2	110,2	110,2	110,4	110,2	110,2	110,2	110,2	110,2	110,2

Continuação da tabela													
		A(10,8,11)	110,2	110,2	110,2	110,2	110,4	110,2	110,2	110,2	110,2	110,2	110,2
		A(8,11,12)	111,5	111,5	111,5	111,5	111,5	111,5	111,5	111,5	111,5	111,5	111,5
		A(8,11,13)	110,8	110,8	111,0	111,1	111,1	110,8	111,0	110,9	111,0	111,0	111,0
		A(8,11,14)	111,5	111,5	111,5	111,5	111,5	111,5	111,5	111,5	111,5	111,5	111,5
		A(12,11,13)	107,6	107,6	107,6	107,6	107,5	107,6	107,6	107,6	107,6	107,6	107,6
		A(12,11,14)	107,7	107,7	107,6	107,4	107,4	107,7	107,6	107,6	107,6	107,6	107,6
		A(13,11,14)	107,6	107,6	107,6	107,5	107,5	107,6	107,6	107,6	107,6	107,6	107,6
	1 C	A(2,1,3)	119,0	118,7	119,6	119,8	119,8	119,3	119,7	119,6	119,6	119,6	119,6
	2 O	A(2,1,5)	125,8	125,8	125,3	124,9	124,9	125,3	125,2	125,3	125,3	125,3	125,3
	3 O	A(3,1,5)	115,2	115,5	115,0	115,3	115,3	115,4	115,0	115,1	115,1	115,1	115,1
	4 H	A(1,3,4)	113,3	113,8	110,7	109,6	109,6	110,6	110,4	110,7	110,7	110,8	110,8
	5 C	A(1,5,6)	108,4	108,4	107,9	108,0	108,0	108,0	108,0	107,9	107,9	107,9	107,9
	6 H	A(1,5,7)	108,4	108,4	107,9	108,0	108,0	108,0	108,0	107,9	107,9	107,9	107,9
	7 H	A(1,5,8)	113,5	113,6	113,8	113,4	113,4	113,7	113,7	113,8	113,8	113,8	113,8
	8 C	A(6,5,7)	106,1	106,2	105,9	105,7	105,7	106,0	105,9	105,9	105,9	105,9	105,9
	9 H	A(6,5,8)	110,1	110,0	110,5	110,7	110,7	110,4	110,5	110,5	110,5	110,5	110,5
	10 H	A(7,5,8)	110,1	110,0	110,5	110,7	110,7	110,4	110,5	110,5	110,5	110,5	110,5
	11 C	A(5,8,9)	109,0	109,1	109,0	108,8	108,8	109,0	109,0	109,0	109,0	109,0	109,0
	12 H	A(5,8,10)	109,0	109,1	109,0	108,8	108,8	109,0	109,0	109,0	109,0	109,0	109,0
	13 H	A(5,8,11)	112,7	112,6	112,8	113,1	113,1	112,6	112,8	112,8	112,8	112,8	112,8
	14 C	A(9,8,10)	105,9	106,0	105,9	105,6	105,6	106,0	105,8	105,9	105,9	105,9	105,9
	15 H	A(9,8,11)	109,9	109,9	110,0	110,1	110,1	110,0	110,0	110,0	110,0	110,0	110,0
	16 H	A(10,8,11)	109,9	109,9	110,0	110,1	110,1	110,0	110,0	110,0	110,0	110,0	110,0
	17 H	A(8,11,12)	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4
		A(8,11,13)	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4
		A(8,11,14)	112,7	112,7	112,9	112,9	112,9	112,8	112,9	112,9	112,9	112,9	112,9
		A(12,11,13)	106,2	106,2	106,1	105,9	105,9	106,2	106,0	106,1	106,1	106,1	106,1
		A(12,11,14)	109,4	109,4	109,4	109,5	109,5	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4
		A(13,11,14)	109,4	109,4	109,4	109,5	109,5	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4	109,4
		A(11,14,15)	111,1	111,1	111,1	111,2	111,2	111,1	111,1	111,1	111,1	111,1	111,1
		A(11,14,16)	111,3	111,3	111,4	111,5	111,5	111,3	111,4	111,4	111,4	111,4	111,4
		A(11,14,17)	111,1	111,1	111,1	111,2	111,2	111,1	111,1	111,1	111,1	111,1	111,1
		A(15,14,16)	107,8	107,8	107,7	107,7	107,7	107,8	107,7	107,7	107,7	107,7	107,7
		A(15,14,17)	107,6	107,6	107,5	107,4	107,4	107,6	107,5	107,5	107,5	107,5	107,5
		A(16,14,17)	107,8	107,8	107,7	107,7	107,7	107,8	107,7	107,7	107,7	107,7	107,7
	1 C	A(2,1,6)	120,2		120,3							120,3	
	2 C	A(2,1,7)	119,7		119,6							119,6	

Continuação da tabela												
	2 O 3 O	L(2,1,3,-3,-2)	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0
F ₂	1 F 2 F		180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0
	1 H 2 H		180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0
H ₂ CO ₃	1 C	A(2,1,3)	125,7	125,7	125,7	125,7	125,7	125,7	125,7	125,7	125,6	125,6
	2 O	A(2,1,4)	125,7	125,7	125,7	125,7	125,7	125,7	125,7	125,7	125,6	125,6
	3 O	A(3,1,4)	108,7	108,7	108,6	108,6	108,6	108,6	108,6	108,7	108,7	108,7
	4 O	A(1,3,6)	110,1	110,7	106,9	105,5	106,5	106,5	106,5	106,8	107,0	107,0
	5 H	A(1,4,5)	110,1	110,7	106,9	105,5	106,5	106,5	106,5	106,8	107,0	107,0
	6 H											
H ₂ PO ₄ ⁻	1,0 P	A(2,1,3)	123,7	124,2	105,9	126,6	126,6	126,6	125,7	125,4	125,2	125,2
	2 O	A(2,1,4)	112,0	110,6	105,9	105,3	105,9	105,9	106,0	106,2	106,3	106,3
	3 O	A(2,1,5)	103,8	104,3	125,3	105,3	105,9	105,9	106,0	106,3	106,3	106,3
	4 O	A(3,1,4)	107,8	107,1	106,3	108,0	107,4	107,4	107,7	107,5	107,5	107,5
	5 O	A(3,1,5)	112,4	111,6	106,3	108,0	107,4	107,4	107,7	107,5	107,5	107,5
	6 H	A(4,1,5)	92,9	95,1	107,6	100,7	100,8	100,8	101,2	101,3	101,5	101,5
	7 H	A(1,4,6)	108,8	110,6	107,6	101,7	104,8	104,8	104,6	105,7	106,2	106,2
		A(1,5,7)	108,1	108,8	101,4	101,7	104,7	104,7	104,6	105,7	106,2	106,2
H ₂ SO ₄	1 S	A(2,1,3)			123,9						123,8	123,8
	2 O	A(2,1,4)			108,1						108,1	108,1
	3 O	A(2,1,5)			108,1						108,1	108,1
	4 O	A(3,1,4)			106,4						106,3	106,3
	5 O	A(3,1,5)			106,4						106,3	106,3
	6 H	A(4,1,5)			102,0						102,0	102,0
	7 H	A(1,4,6)			109,2						109,5	109,5
		A(1,5,7)			109,2						109,5	109,5
H ₃ PO ₄	1,0 P	A(2,1,3)		114,6	113,7	114,3			113,8	113,8	113,7	113,7
	2 O	A(2,1,5)		121,2	118,1	119,4			118,4	118,1	118,0	118,0
	3 O	A(2,1,6)		114,9	114,5	114,7			114,6	114,6	114,5	114,5
	4 O	A(3,1,5)		98,1	101,2	100,0			101,0	101,2	101,3	101,3
	5 O	A(3,1,6)		106,9	105,9	105,6			105,8	105,7	105,9	105,9
	6 H	A(5,1,6)		98,6	101,7	100,7			101,4	101,6	101,8	101,8
	7 H	A(1,3,4)		116,3	115,1	111,2			114,2	114,7	115,4	115,4
	8 H	A(1,5,7)		118,6	113,4	110,4			112,8	113,1	113,6	113,6
		A(1,6,8)		116,5	111,5	108,3			110,8	111,1	111,7	111,7

ANEXO C – VALORES DE POLARIZABILIDADE EM CADA DIREÇÃO DOS TENSORES

Tabela 96: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-sp/MCG

B3LYP-sp/MCG							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF_4^-	20,669	0	20,669	0	0	20,669	20,67
BH_4^-	33,275	0	33,275	0	0	33,275	33,27
CO_3^{2-}	23,282	0	37,184	0	0	37,143	32,54
HCO_3^-	34,074	-2,449	33,717	0	0	19,859	29,22
NO_2^-	13,519	0	32,802	0	0	19,793	22,04
NO_3^-	32,368	0	32,374	0	0	15,192	26,64
OH^-	11,837	0	11,837	0	0	14,162	12,61
AlF_2H	21,173	0	23,907	0	0	25,182	23,42
AlF_3	20,674	0	20,674	0	0	17,551	19,63
AlFH_2	23,762	0	30,573	0	0	26,995	27,11
AlH_3	34,249	0	34,25	0	0	25,951	31,48
BF_3	16,087	0	16,089	0	0	11,589	14,59
BH_3	18,777	0	18,777	0	0	11,767	16,44
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	34,768	1,631	38,855	0	0	25,03	32,88
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	50,235	-1,733	48,724	0	0	35,274	44,74
C_4H_6	45,919	10,47	84,82	0	0	32,792	54,51
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	65,365	-1,251	60,432	0	0	45,481	57,09
$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$	76,221	6,145	77,008	0	0	55,443	69,56
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$	108,46	0,001	90,552	-2,855	-0,003	55,832	84,95
C_6H_6	40,88	0	79,116	0	0	79,114	66,37
CF_4	17,091	0	17,091	0	0	17,091	17,09
CH_2F_2	14,955	0	17,369	0	0	16,148	16,16
CH_3F	15,335	0	15,335	0	0	16,544	15,74
CH_4	15,841	0	15,841	0	0	15,841	15,84
CHF_3	17,301	0	17,301	0	-0,001	15,686	16,76
CO	10,444	0	10,444	0	0	15,177	12,02
CO_2	10,24	0	10,24	0	0	25,705	15,4
F_2	3,525	0	3,525	0	0	11,237	6,1
H_2	2,839	0	2,839	0	0	6,847	4,18
H_2CO_3	16,918	0	28,958	0	0	28,074	24,65
H_2PO_4^-	41,188	0	44,358	0	0,207	39,388	41,64
H_2SO_4	36,418	1,125	32,76	0	0	33,775	34,32
H_3PO_4	35,232	0	35,23	0	0,001	41,699	37,39
HCl	13,772	0	13,772	0	0	16,54	14,69
HF	3,293	0	3,293	0	0	5,715	4,1
HPO_4^{2-}	51,441	-0,025	46,497	-0,277	0,024	45,611	47,85
HSO_4^-	38,861	-1,197	36,584	-0,076	-0,043	37,109	37,52
LiH	4,239	0	4,239	0	0	36,188	14,89
NaCl	19,949	0	19,949	0	0	36,283	25,39
NaH	9,563	0	9,563	0	0	53,834	24,32
O_2	5,821	0	6,377	0	0	13,319	8,51
O_3	9,291	0	29,517	0	0	11,585	16,8
PH_3	29,001	0	28,997	0	0,002	29,44	29,15
PO_4^{3-}	53,106	0	53,106	0	0	53,106	53,11
SH_2	20,04	0	22,044	0	0	21,545	21,21
SiH_4	31,232	0	31,232	0	0	31,232	31,23
SiO_2	23,832	0	23,832	0	0	39,284	28,98
SO_2	17,084	0	32,746	0	0	20,898	23,58
SO_4^{2-}	40,743	0	40,743	0	0	40,743	40,74

Tabela 97: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-sp/aMCG-2d1f

B3LYP-sp/aMCG-2d1f							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF_4^-	23,664	0	23,664	0	0	23,664	23,66
BH_4^-	38,429	0	38,429	0	0	38,429	38,43
CO_3^{2-}	116,652	0	191,327	0	0	134,978	147,65
HCO_3^-	39,557	-1,976	38,377	0	0	23,89	33,94
NO_2^-	20,5	0	42,009	0	0	33,422	31,98
NO_3^-	37,367	0	37,37	0	0	19,57	31,44
OH^-	36,194	0	36,194	0	0	13,868	28,75
AlF_2H	18,572	0	23,809	0	0	24,391	22,26
AlF_3	20,137	0	20,138	0	0	16,012	18,76
AlFH_2	18,389	0	30,299	0	0	26,74	25,14
AlH_3	34,323	0	34,323	0	0	17,337	28,66
BF_3	17,035	0	17,037	0	0	12,866	15,65
BH_3	19,004	0	19,003	0	0	13,332	17,11
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	35,244	1,773	39,439	0	0	25,537	33,41
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	50,83	-1,667	49,085	0	0	35,722	45,21
C_4H_6	45,154	10,474	85,342	0	0	34,392	54,96
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	65,672	-1,158	61,105	0	0	45,972	57,58
$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$	76,647	5,873	77,574	0	0	55,985	70,07
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$	108,454	0,001	90,886	-2,961	-0,003	57,33	85,56
C_6H_6	42,682	0	78,89	0	0	78,885	66,82
CF_4	18,593	0	18,593	0	0	18,593	18,59
CH_2F_2	15,766	0	17,912	0	0	16,696	16,79
CH_3F	15,642	0	15,642	0	0	16,486	15,92
CH_4	15,34	0	15,34	0	0	15,34	15,34
CHF_3	18,391	0	18,391	0	-0,001	16,861	17,88
CO	10,692	0	10,692	0	0	15,582	12,32
CO_2	10,511	0	10,511	0	0	26,268	15,76
F_2	4,986	0	4,986	0	0	11,921	7,3
H_2	2,076	0	2,076	0	0	6,935	3,7
H_2CO_3	17,628	0	29,358	0	0	29,027	25,34
H_2PO_4^-	43,36	0,003	47,296	0,003	0,407	42,677	44,44
H_2SO_4	37,132	1,044	33,627	0	0	34,421	35,06
H_3PO_4	35,555	0	35,553	0	0,001	42,05	37,72
HCl	11,589	0	11,589	0	0	14,793	12,66
HF	3,895	0	3,895	0	0	5,685	4,49
HPO_4^{2-}	566,515	-1,545	321,215	42,607	3,831	291,215	392,98
HSO_4^-	42,034	-1,015	40,332	-0,068	-0,051	40,975	41,11
LiH	2,699	0	2,699	0	0	40,013	15,14
NaCl	21,225	0	21,225	0	0	38,935	27,13
NaH	24,822	0	24,822	0	0	56,341	35,33
O_2	7,282	0	6,458	0	0	13,96	9,23
O_3	10,317	0	30,409	0	0	12,672	17,8
PH_3	25,89	0	25,887	0	0,003	25,493	25,76
PO_4^{3-}	224,196	0,187	164,557	-0,128	0,001	211,721	200,16
SH_2	19,616	0	19,154	0	0	18,315	19,03
SiH_4	27,873	0	27,873	0	0	27,873	27,87
SiO_2	20,166	0	20,166	0	0	40,77	27,03
SO_2	17,121	0	34,279	0	0	20,755	24,05
SO_4^{2-}	57	0	57	0	0	57	57

Tabela 98: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-sp/aMCG-3d2f1g

B3LYP-sp/aMCG-3d2f1g							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	24,391	0	24,391	0	0	24,391	24,39
BH ₄ ⁻	38,979	0	38,979	0	0	38,979	38,98
CO ₃ ⁻²	117,493	0	197,385	0	0	136,951	150,61
HCO ₃ ⁻	40,577	-1,752	40,591	0	0	25,99	35,72
NO ₂ ⁻	22,389	0	43,027	0	0	35,153	33,52
NO ₃ ⁻	38,876	0	38,876	0	0	21,731	33,16
OH ⁻	39,703	0	39,703	0	0	17,37	32,26
AlF ₂ H	21,666	0	24,681	0	0	25,826	24,06
AlF ₃	21,551	0	21,549	0	0	18,567	20,56
AlFH ₂	23,289	0	31,232	0	0	27,777	27,43
AlH ₃	35,136	0	35,137	0	0	24,171	31,48
BF ₃	17,379	0	17,381	0	0	13,524	16,09
BH ₃	19,115	0	19,115	0	0	13,745	17,32
C ₂ H ₄ O ₂	36,722	1,284	40,105	0	0	26,722	34,52
C ₃ H ₆ O ₂	51,399	-1,912	50,781	0	0	36,796	46,33
C ₄ H ₆	47,901	10,766	85,708	0	0	36,829	56,81
C ₄ H ₈ O ₂	67,461	-1,589	61,785	0	0	46,957	58,73
C ₅ H ₁₀ O ₂	78,218	6,637	78,737	0	0	56,948	71,3
C ₆ H ₅ OCH ₃	110,742	0,002	92,438	-2,564	-0,003	59,082	87,42
C ₆ H ₆	44,439	0	80,998	0	0	80,995	68,81
CF ₄	19,492	0	19,492	0	0	19,492	19,49
CH ₂ F ₂	16,819	0	19,076	0	0	17,784	17,89
CH ₃ F	16,599	0	16,598	0	0	18,087	17,09
CH ₄	16,779	0	16,779	0	0	16,779	16,78
CHF ₃	19,332	0	19,334	0	-0,001	17,898	18,85
CO	11,807	0	11,807	0	0	15,444	13,02
CO ₂	12,499	0	12,499	0	0	26,077	17,02
F ₂	6,178	0	6,178	0	0	12,515	8,29
H ₂	4,353	0	4,353	0	0	6,871	5,19
H ₂ CO ₃	19,032	0	30,921	0	0	29,646	26,53
H ₂ PO ₄ ⁻	45,976	-0,001	48,809	-0,001	0,121	44,599	46,46
H ₂ SO ₄	37,899	1,125	34,87	0	0	36	36,26
H ₃ PO ₄	36,998	0	36,995	0	0	42,87	38,95
HCl	15,579	0	15,579	0	0	17,711	16,29
HF	5,033	0	5,033	0	0	6,456	5,51
HPO ₄ ⁻²	537,76	-4,187	327,093	40,426	-1,413	304,269	389,71
HSO ₄ ⁻	44,053	-0,774	41,843	-0,047	-0,037	42,291	42,73
LiH	11,869	0	11,869	0	0	33,562	19,1
NaCl	25,519	0	25,519	0	0	39,161	30,07
NaH	26,339	0	26,339	0	0	56,849	36,51
O ₂	7,784	0	8,612	0	0	14,584	10,33
O ₃	11,557	0	30,864	0	0	13,764	18,73
PH ₃	29,278	0	29,274	0	0,002	30,308	29,62
PO ₄ ⁻³	226,317	0,111	154,33	2,176	4,233	221,907	200,85
SH ₂	23,5	0	22,425	0	0	22,367	22,76
SiH ₄	31,176	0	31,176	0	0	31,176	31,18
SiO ₂	24,007	0	24,007	0	0	40,31	29,44
SO ₂	19,138	0	33,985	0	0	22,62	25,25
SO ₄ ⁻²	57,621	0	57,621	0	0	57,621	57,62

Tabela 99: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-sp/6-311G

B3LYP-sp/6-311G							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	12,906	0	12,906	0	0	12,906	12,91
BH ₄ ⁻	26,023	0	26,023	0	0	26,023	26,02
CO ₃ ²⁻	11,147	0	21,979	0	0	21,701	18,28
HCO ₃ ⁻	25,512	-3,703	24,354	0	0	10,662	20,18
NO ₂ ⁻	6,645	0	23,855	0	0	8,947	13,15
NO ₃ ⁻	23,685	0	23,683	0	0	7,083	18,15
OH ⁻	3,899	0	3,899	0	0	10,282	6,03
AlF ₂ H	13,376	0	19,394	0	0	21,145	17,97
AlF ₃	15,989	0	15,991	0	0	9,962	13,98
AlFH ₂	14,738	0	28,027	0	0	23,091	21,95
AlH ₃	32,262	0	32,262	0	0	14,3	26,27
BF ₃	12,573	0	12,574	0	0	6,885	10,68
BH ₃	17,865	0	17,865	0	0	7,693	14,47
C ₂ H ₄ O ₂	28,305	2,926	33,577	0	0	19,282	27,05
C ₃ H ₆ O ₂	44,641	-1,167	39,396	0	0	29,053	37,7
C ₄ H ₆	41,121	9,179	78,944	0	0	19,485	46,52
C ₄ H ₈ O ₂	54,588	0,869	53,121	0	0	38,699	48,8
C ₅ H ₁₀ O ₂	64,502	3,228	67,51	0	0	48,066	60,03
C ₆ H ₅ OCH ₃	98,416	0,002	81,853	-4,336	-0,005	39,294	73,19
C ₆ H ₆	25,369	0	72,511	0	0	72,511	56,8
CF ₄	12,25	0	12,25	0	0	12,25	12,25
CH ₂ F ₂	11,509	0	13,072	0	0	12,192	12,26
CH ₃ F	12,283	0	12,283	0	0	12,743	12,44
CH ₄	12,866	0	12,866	0	0	12,866	12,87
CHF ₃	12,772	0	12,772	0	0	11,338	12,29
CO	8,259	0	8,259	0	0	13,376	9,96
CO ₂	6,649	0	6,649	0	0	23,417	12,24
F ₂	0,981	0	0,981	0	0	9,997	3,99
H ₂	0	0	0	0	0	6,891	2,3
H ₂ CO ₃	10,001	0	24,752	0	0	22,531	19,09
H ₂ PO ₄ ⁻	38,649	0,001	45,346	-0,001	0,783	38,496	40,83
H ₂ SO ₄	37,279	1,447	32,174	0	0	32,494	33,98
H ₃ PO ₄	32,724	0	32,721	0	0,002	42,645	36,03
HCl	6,412	0	6,412	0	0	12,983	8,6
HF	2,048	0	2,048	0	0	5,015	3,04
HPO ₄ ²⁻	54,726	0,07	54,13	-2,153	0,124	51,179	53,35
HSO ₄ ⁻	32,108	-1,815	27,981	-0,109	-0,017	28,056	29,38
LiH	27,217	0	27,217	0	0	25,735	26,72
NaCl	16,758	0	16,758	0	0	36,595	23,37
NaH	35,107	0	35,107	0	0	52,467	40,89
O ₂	1,929	0	3,362	0	0	11,483	5,59
O ₃	4,485	0	25,386	0	0	6,515	12,13
PH ₃	23,52	0	23,517	0	0,002	21,232	22,76
PO ₄ ³⁻	30,781	0	30,781	0	0	30,781	30,78
SH ₂	8,446	0	17,556	0	0	16,484	14,16
SiH ₄	25,456	0	25,456	0	0	25,456	25,46
SiO ₂	15,605	0	15,605	0	0	38,58	23,26
SO ₂	11,542	0	31,433	0	0	14,08	19,02
SO ₄ ²⁻	27,656	0	27,656	0	0	27,656	27,66

Tabela 100: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-sp/6-311+G

B3LYP-sp/6-311+G							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF_4^-	18,959	0	18,959	0	0	18,959	18,96
BH_4^-	30,035	0	30,035	0	0	30,035	30,03
CO_3^{2-}	28,499	0	50,221	0	0	50,705	43,14
HCO_3^-	36,15	-2,594	33,649	0	0	18,862	29,55
NO_2^-	16,02	0	35,734	0	0	22,764	24,84
NO_3^-	33,512	0	33,519	0	0	14,936	27,32
OH^-	11,15	0	11,15	0	0	11,897	11,4
AlF_2H	15,785	0	22,869	0	0	23,181	20,61
AlF_3	18,773	0	18,776	0	0	12,571	16,71
AlFH_2	15,707	0	29,297	0	0	25,758	23,59
AlH_3	33,705	0	33,706	0	0	14,408	27,27
BF_3	14,858	0	14,86	0	0	8,991	12,9
BH_3	18,151	0	18,151	0	0	7,713	14,67
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	32,336	2,956	37,886	0	0	22,492	30,9
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	49,032	-1,128	44,424	0	0	32,348	41,93
C_4H_6	42,514	9,964	83,314	0	0	30,498	52,11
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	59,926	0,278	58,254	0	0	42,24	53,47
$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$	70,458	3,502	72,944	0	0	51,909	65,1
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$	103,753	0,001	86,798	-3,578	-0,003	52,309	80,95
C_6H_6	38,695	0	76,009	0	0	76,004	63,57
CF_4	15,795	0	15,795	0	0	15,795	15,79
CH_2F_2	13,139	0	15,636	0	0	14,253	14,34
CH_3F	13,35	0	13,35	0	0	14,377	13,69
CH_4	13,396	0	13,396	0	0	13,396	13,4
CHF_3	15,857	0	15,858	0	-0,001	14,05	15,26
CO	9,514	0	9,514	0	0	15,707	11,58
CO_2	7,723	0	7,723	0	0	27,082	14,18
F_2	2,634	0	2,634	0	0	11,243	5,5
H_2	0	0	0	0	0	6,891	2,3
H_2CO_3	14,03	0	27,628	0	0	27,852	23,17
H_2PO_4^-	38,649	0,001	45,346	-0,001	0,783	38,496	40,83
H_2SO_4	37,279	1,447	32,174	0	0	32,494	33,98
H_3PO_4	32,724	0	32,721	0	0,002	42,645	36,03
HCl	6,412	0	6,412	0	0	12,983	8,6
HF	2,048	0	2,048	0	0	5,015	3,04
HPO_4^{2-}	54,726	0,07	54,13	-2,153	0,124	51,179	53,35
HSO_4^-	39,558	-1,662	37,679	-0,112	-0,089	38,798	38,68
LiH	27,41	0	27,41	0	0	25,961	26,93
NaCl	17,767	0	17,767	0	0	38,632	24,72
NaH	35,543	0	35,543	0	0	53,152	41,41
O_2	4,374	0	4,576	0	0	13,245	7,4
O_3	7,807	0	29,276	0	0	9,923	15,67
PH_3	23,79	0	23,786	0	0,003	22,719	23,43
PO_4^{3-}	86,642	0	86,642	0	0	86,642	86,64
SH_2	15,058	0	17,742	0	0	16,582	16,46
SiH_4	26,091	0	26,091	0	0	26,091	26,09
SiO_2	17,02	0	17,02	0	0	44,891	26,31
SO_2	14,135	0	35,781	0	0	17,299	22,4
SO_4^{2-}	47,537	0	47,537	0	0	47,537	47,54

Tabela 101: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-sp/cc-pVDZ

B3LYP-sp/cc-pVDZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	13,986	0	13,986	0	0	13,986	13,99
BH ₄ ⁻	24,511	0	24,511	0	0	24,511	24,51
CO ₃ ²⁻	11,277	0	20,858	0	0	20,652	17,6
HCO ₃ ⁻	23,825	-3,2	23,763	0	0	10,997	19,53
NO ₂ ⁻	6,679	0	22,518	0	0	9,008	12,74
NO ₃ ⁻	22,264	0	22,263	0	0	7,412	17,31
OH ⁻	3,662	0	3,662	0	0	9,507	5,61
AlF ₂ H	17,399	0	19,509	0	0	20,953	19,29
AlF ₃	16,346	0	16,346	0	0	13,526	15,41
AlFH ₂	19,572	0	26,012	0	0	22,475	22,69
AlH ₃	29,433	0	29,433	0	0	20,529	26,46
BF ₃	12,789	0	12,791	0	0	8,32	11,3
BH ₃	17,23	0	17,23	0	0	9,762	14,74
C ₂ H ₄ O ₂	28,705	1,996	32,661	0	0	19,417	26,93
C ₃ H ₆ O ₂	43,551	-1,633	40,574	0	0	28,989	37,7
C ₄ H ₆	42,519	9,432	78,481	0	0	18,819	46,61
C ₄ H ₈ O ₂	56,003	-0,137	52,215	0	0	38,503	48,91
C ₅ H ₁₀ O ₂	65,53	4,973	67,45	0	0	47,752	60,24
C ₆ H ₅ OCH ₃	99,982	0,002	83,037	-4,152	-0,005	38,413	73,81
C ₆ H ₆	24,343	0	73,704	0	0	73,704	57,25
CF ₄	12,422	0	12,422	0	0	12,422	12,42
CH ₂ F ₂	12,269	0	13,259	0	0	12,636	12,72
CH ₃ F	12,735	0	12,735	0	0	13,183	12,88
CH ₄	13,122	0	13,122	0	0	13,122	13,12
CHF ₃	12,927	0	12,928	0	0	12,034	12,63
CO	8,242	0	8,242	0	0	12,333	9,61
CO ₂	7,565	0	7,565	0	0	21,152	12,09
F ₂	1,501	0	1,501	0	0	9,462	4,15
H ₂	1,181	0	1,181	0	0	6,485	2,95
H ₂ CO ₃	10,569	0	24,701	0	0	21,292	18,85
H ₂ PO ₄ ⁻	28,721	0	32,636	0	0,32	25,587	28,98
H ₂ SO ₄	29,089	1,621	24,163	0	0	25,874	26,38
H ₃ PO ₄	25,714	0	25,715	0	-0,001	34,852	28,76
HCl	6,44	0	6,44	0	0	13,145	8,67
HF	1,634	0	1,634	0	0	4,334	2,53
HPO ₄ ²⁻	33,324	-0,006	26,882	-0,758	-0,008	26,829	29,01
HSO ₄ ⁻	28,305	-1,624	24,902	-0,095	0,001	24,754	25,99
LiH	30,983	0	30,983	0	0	23,484	28,48
NaCl	22,246	0	22,246	0	0	34,861	26,45
NaH	38,219	0	38,219	0	0	52,479	42,97
O ₂	3,544	0	2,541	0	0	11,014	5,7
O ₃	4,789	0	24,324	0	0	6,876	12
PH ₃	24,024	0	24,024	0	0	20,896	22,98
PO ₄ ³⁻	26,918	0	26,918	0	0	26,918	26,92
SH ₂	9,669	0	18,192	0	0	16,81	14,89
SiH ₄	26,536	0	26,536	0	0	26,536	26,54
SiO ₂	17,934	0	17,934	0	0	32,909	22,93
SO ₂	11,747	0	26,971	0	0	14,399	17,71
SO ₄ ²⁻	24,213	0	24,213	0	0	24,213	24,21

Tabela 102: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-sp/aug-cc-pVDZ

B3LYP-sp/aug-cc-pVDZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	24,092	0	24,092	0	0	24,092	24,09
BH ₄ ⁻	40,31	0	40,31	0	0	40,31	40,31
CO ₃ ⁻²	39,329	0	58,852	0	0	59,977	52,72
HCO ₃ ⁻	38,976	-1,818	39,42	0	0	24,812	34,4
NO ₂ ⁻	20,369	0	39,563	0	0	29,635	29,86
NO ₃ ⁻	36,855	0	36,86	0	0	20,48	31,4
OH ⁻	24,916	0	24,916	0	0	18,253	22,69
AlF ₂ H	21,881	0	24,525	0	0	25,562	23,99
AlF ₃	21,214	0	21,215	0	0	18,253	20,23
AlFH ₂	24,918	0	31,214	0	0	27,81	27,98
AlH ₃	35,437	0	35,439	0	0	27,979	32,95
BF ₃	17,193	0	17,196	0	0	13,12	15,84
BH ₃	19,223	0	19,218	0	0	14,597	17,68
C ₂ H ₄ O ₂	36,62	1,284	40,223	0	0	26,49	34,44
C ₃ H ₆ O ₂	51,46	-1,868	50,792	0	0	36,658	46,3
C ₄ H ₆	48,53	10,831	85,95	0	0	37,05	57,18
C ₄ H ₈ O ₂	67,466	-1,607	61,892	0	0	46,82	58,73
C ₅ H ₁₀ O ₂	78,307	6,591	78,797	0	0	56,811	71,3
C ₆ H ₅ OCH ₃	111,082	0,002	92,606	-2,531	-0,003	59,166	87,62
C ₆ H ₆	44,554	0	81,397	0	0	81,394	69,12
CF ₄	18,918	0	18,918	0	0	18,918	18,92
CH ₂ F ₂	16,48	0	18,906	0	0	17,599	17,66
CH ₃ F	16,446	0	16,446	0	0	18,217	17,04
CH ₄	16,931	0	16,931	0	0	16,931	16,93
CHF ₃	18,919	0	18,921	0	-0,001	17,469	18,44
CO	11,726	0	11,726	0	0	15,346	12,93
CO ₂	12,11	0	12,11	0	0	25,862	16,69
F ₂	5,429	0	5,429	0	0	11,993	7,62
H ₂	4,527	0	4,527	0	0	7	5,35
H ₂ CO ₃	18,638	0	30,727	0	0	29,396	26,25
H ₂ PO ₄ ⁻	45,619	-0,001	48,746	-0,004	0,218	44,268	46,21
H ₂ SO ₄	38,051	1,205	34,759	0	0	35,888	36,23
H ₃ PO ₄	36,837	0	36,836	0	0,001	43,334	39
HCl	15,565	0	15,565	0	0	17,938	16,36
HF	4,478	0	4,478	0	0	6,495	5,15
HPO ₄ ⁻²	67,777	-0,074	61,653	0,483	0,019	61,143	63,52
HSO ₄ ⁻	43,582	-0,811	41,313	-0,05	-0,03	41,669	42,19
LiH	31,056	0	31,056	0	0	27,536	29,88
NaCl	28,498	0	28,498	0	0	39,382	32,13
NaH	38,114	0	38,114	0	0	59,702	45,31
O ₂	7,857	0	7,171	0	0	14,062	9,7
O ₃	10,832	0	30,396	0	0	13,14	18,12
PH ₃	29,983	0	29,978	0	0,002	31,409	30,46
PO ₄ ⁻³	102,374	0	102,374	0	0	102,374	102,37
SH ₂	24,072	0	23,724	0	0	23,508	23,77
SiH ₄	32,189	0	32,189	0	0	32,189	32,19
SiO ₂	23,882	0	23,882	0	0	40,214	29,33
SO ₂	18,656	0	34,116	0	0	22,532	25,1
SO ₄ ⁻²	53,595	0	53,595	0	0	53,595	53,59

Tabela 103: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-sp/cc-pVTZ

B3LYP-sp/cc-pVTZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF_4^-	18,283	0	18,283	0	0	18,283	18,28
BH_4^-	29,777	0	29,777	0	0	29,777	29,78
CO_3^{-2}	16,875	0	27,782	0	0	27,619	24,09
HCO_3^-	28,769	-2,733	28,739	0	0	15,845	24,45
NO_2^-	9,907	0	26,518	0	0	12,841	16,42
NO_3^-	26,531	0	26,529	0	0	11,496	21,52
OH^-	6,871	0	6,871	0	0	11,636	8,46
AlF_2H	20,069	0	22,108	0	0	23,493	21,89
AlF_3	18,781	0	18,782	0	0	16,297	17,95
AlFH_2	22,767	0	28,696	0	0	25,164	25,54
AlH_3	32,148	0	32,149	0	0	25,086	29,79
BF_3	15,083	0	15,083	0	0	10,885	13,68
BH_3	18,477	0	18,477	0	0	12,22	16,39
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	32,59	1,566	36,467	0	0	23,242	30,77
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	47,759	-1,74	46,13	0	0	33,348	42,41
C_4H_6	45,19	10,11	82,255	0	0	26,925	51,46
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	62,491	-1,052	57,516	0	0	43,359	54,46
$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$	72,932	6,085	73,861	0	0	53,112	66,64
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$	105,876	0,002	87,895	-3,296	-0,004	48,711	80,83
C_6H_6	33,801	0	77,266	0	0	77,267	62,78
CF_4	15,654	0	15,654	0	0	15,654	15,65
CH_2F_2	14,334	0	15,957	0	0	15,106	15,13
CH_3F	14,773	0	14,773	0	0	15,541	15,03
CH_4	15,263	0	15,263	0	0	15,263	15,26
CHF_3	15,872	0	15,871	0	0	14,58	15,44
CO	10,118	0	10,118	0	0	13,862	11,37
CO_2	9,914	0	9,914	0	0	23,448	14,43
F_2	2,907	0	2,907	0	0	10,589	5,47
H_2	2,613	0	2,613	0	0	6,869	4,03
H_2CO_3	14,614	0	27,429	0	0	25,231	22,42
H_2PO_4^-	34,757	0	38,179	0	0,286	32,411	35,12
H_2SO_4	33,395	1,314	29,206	0	0	30,544	31,05
H_3PO_4	31,008	0	31,009	0	0	38,81	33,61
HCl	10,339	0	10,339	0	0	15,267	11,98
HF	2,778	0	2,778	0	0	5,367	3,64
HPO_4^{-2}	40,626	-0,007	35,146	-0,647	-0,003	34,993	36,92
HSO_4^-	33,818	-1,339	31,079	-0,079	-0,001	30,978	31,96
LiH	29,932	0	29,932	0	0	26,121	28,66
NaCl	26,071	0	26,071	0	0	36,876	29,67
NaH	37,432	0	37,432	0	0	55,251	43,37
O_2	4,328	0	4,883	0	0	12,281	7,16
O_3	6,893	0	26,842	0	0	9,157	14,3
PH_3	27,027	0	27,025	0	0,001	25,639	26,56
PO_4^{-3}	36,933	0	36,933	0	0	36,933	36,93
SH_2	15,408	0	20,79	0	0	20,046	18,75
SiH_4	29,71	0	29,71	0	0	29,71	29,71
SiO_2	21,531	0	21,531	0	0	35,632	26,23
SO_2	15,057	0	30,017	0	0	18,358	21,14
SO_4^{-2}	31,712	0	31,712	0	0	31,712	31,71

Tabela 104: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-sp/aug-cc-pVTZ

B3LYP-sp/aug-cc-pVTZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	24,668	0	24,668	0	0	24,668	24,67
BH ₄ ⁻	41,967	0	41,967	0	0	41,967	41,97
CO ₃ ⁻²	44,51	0	69,857	0	0	71,844	62,07
HCO ₃ ⁻	40,205	-1,768	40,672	0	0,001	25,883	35,59
NO ₂ ⁻	22,085	0	41,455	0	0	32,447	32
NO ₃ ⁻	38,276	0	38,275	0	0	21,647	32,73
OH ⁻	29,374	0	29,374	0	0	21,109	26,62
AlF ₂ H	22,619	0	24,965	0	0	26,294	24,63
AlF ₃	21,992	0	21,995	0	0	19,19	21,06
AlFH ₂	25,348	0	31,593	0	0	28,027	28,32
AlH ₃	35,388	0	35,388	0	0	27,873	32,88
BF ₃	17,493	0	17,494	0	0	13,605	16,2
BH ₃	19,188	0	19,188	0	0	14,614	17,66
C ₂ H ₄ O ₂	36,917	1,255	40,264	0	0	26,813	34,66
C ₃ H ₆ O ₂	51,555	-1,948	50,975	0	0	36,902	46,48
C ₄ H ₆	49,04	10,812	85,778	0	0	37,258	57,36
C ₄ H ₈ O ₂	67,67	-1,604	61,929	0	0	47,052	58,88
C ₅ H ₁₀ O ₂	78,394	6,682	78,932	0	0	57,045	71,46
C ₆ H ₅ OCH ₃	111,168	0,001	92,738	-2,523	-0,004	59,323	87,74
C ₆ H ₆	44,756	0	81,597	0	0	81,595	69,32
CF ₄	19,515	0	19,515	0	0	19,515	19,52
CH ₂ F ₂	16,976	0	19,205	0	0	17,975	18,05
CH ₃ F	16,78	0	16,78	0	0	18,368	17,31
CH ₄	17,02	0	17,02	0	0	17,02	17,02
CHF ₃	19,395	0	19,396	0	-0,001	17,995	18,93
CO	12,057	0	12,057	0	0	15,46	13,19
CO ₂	12,745	0	12,745	0	0	26,005	17,16
F ₂	6,158	0	6,158	0	0	12,45	8,25
H ₂	4,921	0	4,921	0	0	6,819	5,55
H ₂ CO ₃	19,105	0	31,169	0	0	29,679	26,65
H ₂ PO ₄ ⁻	46,29	-0,002	49,128	0,006	0,105	44,918	46,78
H ₂ SO ₄	38,063	1,151	35,02	0	0	36,185	36,42
H ₃ PO ₄	37,163	0	37,159	0	0	43,113	39,15
HCl	16,957	0	16,957	0	0	18,746	17,55
HF	5,083	0	5,083	0	0	6,597	5,59
HPO ₄ ⁻²	71,256	-0,057	65,815	-0,017	0,048	64,712	67,26
HSO ₄ ⁻	44,243	-0,808	41,949	-0,051	-0,033	42,346	42,85
LiH	30,476	0	30,476	0	0	28,373	29,78
NaCl	30,222	0	30,222	0	0	40,442	33,63
NaH	37,91	0	37,91	0	0	58,069	44,63
O ₂	7,811	0	8,543	0	0	14,542	10,3
O ₃	11,525	0	30,821	0	0	13,74	18,7
PH ₃	30,503	0	30,499	0	0,002	32,282	31,09
PO ₄ ⁻³	130,083	0	130,083	0	0	130,083	130,08
SH ₂	25,531	0	24,741	0	0	24,672	24,98
SiH ₄	32,152	0	32,152	0	0	32,152	32,15
SiO ₂	25,22	0	25,22	0	0	40,22	30,22
SO ₂	19,474	0	34,158	0	0	23,046	25,56
SO ₄ ⁻²	56,756	0	56,756	0	0	56,756	56,76

Tabela 105: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-sp/pc-3

B3LYP-sp/pc-3							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	23,657	0	23,657	0	0	23,657	23,66
BH ₄ ⁻	37,539	0	37,539	0	0	37,539	37,54
CO ₃ ⁻²	34,456	0	50,602	0	0	51,061	45,37
HCO ₃ ⁻	38,288	-1,851	38,412	0	0	24,021	33,57
NO ₂ ⁻	17,554	0	37,22	0	0	24,734	26,5
NO ₃ ⁻	35,968	0	35,972	0	0	19,651	30,53
OH ⁻	20,073	0	20,073	0	0	16,155	18,77
AlF ₂ H	21,466	0	24,34	0	0	25,702	23,84
AlF ₃	21,369	0	21,369	0	0	18,21	20,32
AlFH ₂	23,292	0	31,088	0	0	27,429	27,27
AlH ₃	34,967	0	34,968	0	0	24,336	31,42
BF ₃	17,237	0	17,239	0	0	13,251	15,91
BH ₃	19,06	0	19,06	0	0	13,625	17,25
C ₂ H ₄ O ₂	36,428	1,304	39,948	0	0	26,417	34,26
C ₃ H ₆ O ₂	51,252	-1,866	50,578	0	0	36,594	46,14
C ₄ H ₆	47,928	10,769	85,672	0	0	36,401	56,67
C ₄ H ₈ O ₂	67,25	-1,603	61,674	0	0	46,782	58,57
C ₅ H ₁₀ O ₂	78,085	6,591	78,568	0	0	56,786	71,15
C ₆ H ₅ OCH ₃	110,638	0,001	92,328	-2,573	-0,003	58,888	87,28
C ₆ H ₆	44,229	0	80,963	0	0	80,96	68,72
CF ₄	19,129	0	19,129	0	0	19,129	19,13
CH ₂ F ₂	16,498	0	18,86	0	0	17,576	17,64
CH ₃ F	16,416	0	16,415	0	0	17,911	16,91
CH ₄	16,693	0	16,693	0	0	16,693	16,69
CHF ₃	19,037	0	19,038	0	-0,001	17,532	18,54
CO	11,686	0	11,686	0	0	15,384	12,92
CO ₂	12,175	0	12,175	0	0	25,998	16,78
F ₂	5,519	0	5,519	0	0	12,244	7,76
H ₂	4,27	0	4,27	0	0	6,833	5,12
H ₂ CO ₃	18,589	0	30,549	0	0	29,471	26,2
H ₂ PO ₄ ⁻	43,97	0	47,014	0	0,327	42,49	44,49
H ₂ SO ₄	37,56	1,059	34,202	0	0	35,313	35,69
H ₃ PO ₄	36,183	0	36,181	0	0,001	42,519	38,29
HCl	13,765	0	13,765	0	0	17,188	14,91
HF	4,651	0	4,651	0	0	6,37	5,22
HPO ₄ ⁻²	59,193	-0,042	54,397	0,084	0,011	53,909	55,83
HSO ₄ ⁻	42,198	-0,8	40,107	-0,048	-0,015	40,256	40,85
LiH	27,873	0	27,873	0	0	27,891	27,88
NaCl	24,047	0	24,047	0	0	39,277	29,12
NaH	35,199	0	35,199	0	0	55,975	42,12
O ₂	7,724	0	7,088	0	0	14,148	9,65
O ₃	10,648	0	30,348	0	0	12,929	17,97
PH ₃	29,107	0	29,103	0	0,002	29,87	29,36
PO ₄ ⁻³	71,612	0	71,612	0	0	71,612	71,61
SH ₂	22,681	0	22,527	0	0	22,357	22,52
SiH ₄	30,977	0	30,977	0	0	30,977	30,98
SiO ₂	23,182	0	23,182	0	0	40,205	28,86
SO ₂	18,156	0	33,33	0	0	21,767	24,42
SO ₄ ⁻²	48,554	0	48,554	0	0	48,554	48,55

Tabela 106: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-sp/aug-pc-3

B3LYP-sp/aug-pc-3							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF_4^-	25,049	0	25,049	0	0	25,049	25,05
BH_4^-	42,47	0	42,47	0	0	42,47	42,47
CO_3^{2-}	321,763	0	675,897	0	0	321,336	439,67
HCO_3^-	41,371	-1,747	41,876	-0,003	0,002	27,091	36,78
NO_2^-	26,092	0	45,094	0	0	39,222	36,8
NO_3^-	39,817	0	39,818	0	0	22,93	34,19
OH^-	49,401	0	49,401	0	0	27,287	42,03
AlF_2H	22,832	0	25,045	0	0	26,446	24,77
AlF_3	22,148	0	22,149	0	0	19,496	21,26
AlFH_2	25,438	0	31,711	0	0	28,056	28,4
AlH_3	35,385	0	35,386	0	0	27,82	32,86
BF_3	17,546	0	17,547	0	0	13,799	16,3
BH_3	19,167	0	19,167	0	0	14,609	17,65
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	36,997	1,233	40,245	0	0	26,948	34,73
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	51,528	-1,951	50,979	0	0	36,973	46,49
C_4H_6	49,204	10,786	85,698	0	0	37,289	57,4
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	0	0	0	0	0	0	0
$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$	0	0	0	0	0	0	0
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$	0	0	0	0	0	0	0
C_6H_6	0	0	0	0	0	0	0
CF_4	19,709	0	19,709	0	0	19,709	19,71
CH_2F_2	17,153	0	19,298	0	0	18,085	18,18
CH_3F	16,897	0	16,896	0	0	18,386	17,39
CH_4	17,032	0	17,032	0	0	17,032	17,03
CHF_3	19,549	0	19,55	0	-0,001	18,177	19,09
CO	12,119	0	12,119	0	0	15,442	13,23
CO_2	12,956	0	12,956	0	0	26,034	17,32
F_2	6,584	0	6,584	0	0	12,757	8,64
H_2	4,907	0	4,907	0	0	6,824	5,55
H_2CO_3	19,3	0	31,294	0	0	29,781	26,79
H_2PO_4^-	46,912	0,002	49,427	0	0,023	45,273	47,2
H_2SO_4	38,01	1,14	35,013	0	0	36,207	36,41
H_3PO_4	37,204	0	37,2	0	0,001	43,005	39,14
HCl	17,546	0	17,546	0	0	19,093	18,06
HF	5,522	0	5,522	0	0	6,656	5,9
HPO_4^{2-}	82,956	-0,106	79,147	-1,732	0,267	75,37	79,16
HSO_4^-	44,701	-0,776	42,37	-0,054	-0,035	42,843	43,3
LiH	30,483	0	30,483	0	0	28,326	29,76
NaCl	30,863	0	30,863	0	0	40,617	34,11
NaH	37,543	0	37,543	0	0	56,816	43,97
O_2	8,964	0	8,138	0	0	14,908	10,67
O_3	11,876	0	31,028	0	0	14,069	18,99
PH_3	30,544	0	30,54	0	0,002	32,445	31,18
PO_4^{3-}	0	0	0	0	0	0	0
SH_2	26,051	0	25,096	0	0	25,075	25,41
SiH_4	32,059	0	32,059	0	0	32,059	32,06
SiO_2	25,509	0	25,509	0	0	40,176	30,4
SO_2	19,852	0	34,013	0	0	23,231	25,7
SO_4^{2-}	64,34	0	64,34	0	0	64,34	64,34

Tabela 107: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-opt/MCG

B3LYP-opt/MCG							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF_4^-	20,674	0	20,674	0	0	20,674	20,67
BH_4^-	33,199	0	33,199	0	0	33,199	33,2
CO_3^{-2}	37,678	0	37,679	0	0	23,361	32,91
HCO_3^-	34,058	-2,423	33,71	0	0	19,861	29,21
NO_2^-	13,515	0	32,81	0	0	19,792	22,04
NO_3^-	32,283	0	32,284	0	0	15,183	26,58
OH^-	11,837	0	11,837	0	0	14,149	12,61
AlF_2H	21,149	0	25,118	0	0	23,872	23,38
AlF_3	20,678	0	20,673	0	0	17,552	19,63
AlFH_2	23,721	0	30,446	0	0	26,926	27,03
AlH_3	34,064	0	34,063	0	0	25,882	31,34
BF_3	16,096	0	16,096	0	0	11,592	14,59
BH_3	18,72	0	18,719	0	0	11,749	16,4
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	34,756	1,612	38,818	0	0	25,014	32,86
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	49,673	1,875	49,226	0,001	0,001	35,247	44,72
C_4H_6	62,638	-21,92	68,031	0	0	32,79	54,49
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	65,594	0,624	60,147	0,001	0,001	45,44	57,06
$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$	82,318	2,375	70,863	0,001	0,001	55,4	69,53
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$	108,459	0,001	90,545	-2,856	-0,002	55,84	84,95
C_6H_6	79,123	0	79,124	0	0	40,896	66,38
CF_4	17,087	0	17,087	0	0	17,087	17,09
CH_2F_2	14,941	0	17,364	0	0	16,142	16,15
CH_3F	15,321	0	15,321	0	0	16,537	15,73
CH_4	15,823	0	15,823	0	0	15,823	15,82
CHF_3	17,299	0	17,299	0	0	15,673	16,76
CO	10,443	0	10,443	0	0	15,16	12,02
CO_2	10,235	0	10,235	0	0	25,678	15,38
F_2	3,524	0	3,524	0	0	11,194	6,08
H_2	2,835	0	2,835	0	0	6,826	4,17
H_2CO_3	16,914	0	28,93	0	0	28,047	24,63
H_2PO_4^-	41,252	-0,008	44,403	0	-0,214	39,464	41,71
H_2SO_4	33,958	0,006	36,811	-0,003	-0,584	32,697	34,49
H_3PO_4	37,795	0,255	36,537	-1,397	-0,45	36,208	36,85
HCl	13,771	0	13,771	0	0	16,496	14,68
HF	3,292	0	3,292	0	0	5,706	4,1
HPO_4^{-2}	51,639	-0,001	46,845	0,181	0,001	45,876	48,12
HSO_4^-	39,042	-1,141	36,834	0,326	0,17	37,207	37,69
LiH	4,239	0	4,239	0	0	36,237	14,91
NaCl	19,947	0	19,947	0	0	36,19	25,36
NaH	9,561	0	9,561	0	0	53,721	24,28
O_2	5,813	0	6,379	0	0	13,249	8,48
O_3	9,283	0	29,386	0	0	11,561	16,74
PH_3	29,02	0	29,02	0	0,007	29,458	29,17
PO_4^{-3}	53,235	0	53,235	0	0	53,235	53,24
SH_2	20,041	0	22,079	0	0	21,537	21,22
SiH_4	31,107	0	31,107	0	0	31,107	31,11
SiO_2	23,694	0	23,694	0	0	38,744	28,71
SO_2	17,082	0	32,791	0	0	21,007	23,63
SO_4^{-2}	0	0	0	0	0	0	0

Tabela 108: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-opt/aMCG-2d1f

B3LYP-opt/aMCG-2d1f							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	22,919	0	22,919	0	0	22,919	22,92
BH ₄ ⁻	35,727	0	35,727	0	0	35,727	35,73
CO ₃ ⁻²	214,303	1,969	91,23	0	0	112,827	139,45
HCO ₃ ⁻	39,54	-1,977	38,397	0	0	23,891	33,94
NO ₂ ⁻	42,012	0	33,417	0	0	20,496	31,98
NO ₃ ⁻	37,369	0	37,368	0	0	19,57	31,44
OH ⁻	36,178	0	36,178	0	0	13,868	28,74
AlF ₂ H	18,571	0	23,813	0	0	24,391	22,26
AlF ₃	20,141	0	20,136	0	0	16,012	18,76
AlFH ₂	18,389	0	30,309	0	0	26,741	25,15
AlH ₃	34,331	0	34,328	0	0	17,337	28,67
BF ₃	16,412	0	16,412	0	0	12,038	14,95
BH ₃	18,875	0	18,875	0	0	10,246	16
C ₂ H ₄ O ₂	35,388	1,93	39,3	0	-0,001	25,537	33,41
C ₃ H ₆ O ₂	50,018	1,88	49,892	0,001	0,001	35,722	45,21
C ₄ H ₆	62,755	-22,52	67,733	0	0	34,375	54,95
C ₄ H ₈ O ₂	65,877	0,58	60,898	0,001	0,001	45,971	57,58
C ₅ H ₁₀ O ₂	82,518	2,352	71,704	0,001	0,001	55,991	70,07
C ₆ H ₅ OCH ₃	108,458	0,001	90,891	-2,956	-0,003	57,35	85,57
C ₆ H ₆	78,888	0	78,888	0	0	42,688	66,82
CF ₄	18,591	0	18,591	0	0	18,591	18,59
CH ₂ F ₂	15,766	0	17,913	0	0	16,697	16,79
CH ₃ F	15,642	0	15,643	0	0	16,487	15,92
CH ₄	15,339	0	15,339	0	0	15,339	15,34
CHF ₃	18,393	0	18,393	0	0	16,861	17,88
CO	10,693	0	10,693	0	0	15,582	12,32
CO ₂	10,511	0	10,511	0	0	26,266	15,76
F ₂	4,986	0	4,986	0	0	11,915	7,3
H ₂	2,076	0	2,076	0	0	6,935	3,7
H ₂ CO ₃							
H ₂ PO ₄ ⁻	43,356	-0,007	47,302	-0,003	0,407	42,68	44,45
H ₂ SO ₄	34,514	0,479	37,191	-0,213	-0,62	33,478	35,06
H ₃ PO ₄	35,559	0	35,56	0	0	42,05	37,72
HCl	11,589	0	11,589	0	0	14,794	12,66
HF	3,895	0	3,895	0	0	5,685	4,49
HPO ₄ ⁻²	555,191	-3,932	317,985	37,78	2,171	273,592	382,26
HSO ₄ ⁻	42,051	0,924	40,489	-0,437	0,273	40,836	41,13
LiH	2,7	0	2,7	0	0	40,025	15,14
NaCl	21,224	0	21,224	0	0	38,942	27,13
NaH	24,823	0	24,823	0	0	56,321	35,32
O ₂	6,458	0	7,283	0	0	13,959	9,23
O ₃	30,414	0	12,675	0	0	10,318	17,8
PH ₃	25,889	0	25,889	0	0	25,493	25,76
PO ₄ ⁻³	1726,521	-0,001	1706,949	0,343	2,196	-71,964	1120,5
SH ₂	19,619	0	19,151	0	0	18,313	19,03
SiH ₄	27,871	0	27,871	0	0	27,871	27,87
SiO ₂	20,165	0	20,165	0	0	40,771	27,03
SO ₂	17,123	0	34,291	0	0	20,763	24,06
SO ₄ ⁻²	57,451	-0,004	57,461	-0,005	0	57,457	57,46

Tabela 109: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-opt/aMCG-3d2f1g

B3LYP-opt/aMCG-3d2f1g							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	24,386	0	24,386	0	0	24,386	24,39
BH ₄ ⁻	38,902	0	38,902	0	0	38,902	38,9
CO ₃ ⁻²	117,856	0	225,968	0	0	140,229	161,35
HCO ₃ ⁻	40,566	-1,74	40,589	0	0	25,982	35,71
NO ₂ ⁻	22,398	0	43,003	0	0	35,212	33,54
NO ₃ ⁻	38,836	0	38,836	0	0	21,719	33,13
OH ⁻	39,664	0	39,664	0	0	17,345	32,22
AlF ₂ H	21,641	0	24,632	0	0	25,753	24,01
AlF ₃	21,525	0	21,518	0	0	18,554	20,53
AlFH ₂	23,251	0	31,129	0	0	27,688	27,36
AlH ₃	34,973	0	34,971	0	0	24,113	31,35
BF ₃	17,382	0	17,383	0	0	13,525	16,1
BH ₃	19,067	0	19,067	0	0	13,726	17,29
C ₂ H ₄ O ₂	36,704	1,278	40,069	0	0	26,698	34,49
C ₃ H ₆ O ₂	51,343	-1,917	50,746	0	0	36,758	46,28
C ₄ H ₆	47,839	10,767	85,584	0	0	36,789	56,74
C ₄ H ₈ O ₂	67,408	-1,594	61,719	0	0	46,9	58,68
C ₅ H ₁₀ O ₂	78,148	6,655	78,666	0	0	56,883	71,23
C ₆ H ₅ OCH ₃	110,641	0,001	92,347	-2,553	-0,003	59,064	87,35
C ₆ H ₆	44,421	0	80,915	0	0	80,912	68,75
CF ₄	19,49	0	19,49	0	0	19,49	19,49
CH ₂ F ₂	16,802	0	19,071	0	0	17,777	17,88
CH ₃ F	16,567	0	16,567	0	0	18,069	17,07
CH ₄	16,75	0	16,75	0	0	16,75	16,75
CHF ₃	19,33	0	19,331	0	0	17,886	18,85
CO	11,805	0	11,805	0	0	15,434	13,01
CO ₂	12,495	0	12,495	0	0	26,064	17,02
F ₂	6,176	0	6,176	0	0	12,497	8,28
H ₂	4,346	0	4,346	0	0	6,855	5,18
H ₂ CO ₃	19,028	0	30,908	0	0	29,631	26,52
H ₂ PO ₄ ⁻	45,98	0,004	48,795	-0,002	0,11	44,604	46,46
H ₂ SO ₄	38,078	1,067	35,009	0	0	36,17	36,42
H ₃ PO ₄	37,023	0	37,025	0	0	42,847	38,97
HCl	15,579	0	15,579	0	0	17,706	16,29
HF	5,032	0	5,032	0	0	6,451	5,51
HPO ₄ ⁻²	0	0	0	0	0	0	0
HSO ₄ ⁻	44,266	-0,748	42,042	-0,025	-0,021	42,471	42,93
LiH	11,874	0	11,874	0	0	33,732	19,16
NaCl	25,511	0	25,511	0	0	39,121	30,05
NaH	26,336	0	26,336	0	0	56,807	36,49
O ₂	7,778	0	8,612	0	0	14,562	10,32
O ₃	11,551	0	30,811	0	0	13,757	18,71
PH ₃	29,276	0	29,276	0	0	30,307	29,62
PO ₄ ⁻³	826,879	-397,825	465,861	0	0	197,549	496,76
SH ₂	23,504	0	22,454	0	0	22,352	22,77
SiH ₄	31,045	0	31,045	0	0	31,045	31,05
SiO ₂	23,861	0	23,861	0	0	39,763	29,16
SO ₂	19,139	0	34,037	0	0	22,692	25,29
SO ₄ ⁻²	57,761	0	57,761	0	0	57,761	57,76

Tabela 110: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-opt/6-311G

B3LYP-opt/6-311G							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF_4^-	13,272	0	13,272	0	0	13,272	13,27
BH_4^-	25,997	0	25,997	0	0	25,997	26
CO_3^{2-}	23,458	0	23,458	0	0	11,178	19,36
HCO_3^-	26,602	-3,814	25,607	0	0	10,71	20,97
NO_2^-	6,504	0	25,748	0	0	9,475	13,91
NO_3^-	25,291	0	25,29	0	0	7,027	19,2
OH^-	3,733	0	3,733	0	0	11,091	6,19
AlF_2H	13,488	0	20,422	0	0	21,942	18,62
AlF_3	17,374	0	17,373	0	0	10,412	15,05
AlFH_2	14,827	0	28,367	0	0	23,847	22,35
AlH_3	32,509	0	32,508	0	0	14,366	26,46
BF_3	13,006	0	13,006	0	0	7,019	11,01
BH_3	17,863	0	17,863	0	0	7,693	14,47
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	28,103	2,096	35,327	0	-0,001	19,286	27,57
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	41,171	2,645	44,619	0	0,001	29,086	38,29
C_4H_6	58,702	-21,362	62,374	0	0	19,503	46,86
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	54,775	1,392	54,895	-0,001	0,002	38,762	49,48
$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$	69,781	-2,81	64,459	0	-0,001	48,172	60,8
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$	100,488	0,002	82,475	-4,198	-0,005	39,657	74,21
C_6H_6	73,135	0	73,136	0	0	25,417	57,23
CF_4	13,245	0	13,245	0	0	13,245	13,25
CH_2F_2	11,271	0	14,173	0	0	12,372	12,61
CH_3F	12,138	0	12,138	0	0	13,452	12,58
CH_4	12,873	0	12,873	0	0	12,873	12,87
CHF_3	13,717	0	13,717	0	0	11,282	12,91
CO	8,257	0	8,257	0	0	13,755	10,09
CO_2	6,808	0	6,808	0	0	24,405	12,67
F_2	0,964	0	0,964	0	0	11,169	4,37
H_2	0	0	0	0	0	6,868	2,29
H_2CO_3	10,072	0	25,89	0	0	23,281	19,75
H_2PO_4^-	39,831	-1,153	36,634	-1,227	0,654	31,822	36,1
H_2SO_4	0	0	0	0	0	0	0
H_3PO_4	37,305	-1,844	33,199	-0,777	-0,091	31,079	33,86
HCl	37,305	-1,844	33,199	-0,777	-0,091	31,079	33,86
HF	1,068	0	1,068	0	0	4,686	2,27
HPO_4^{2-}	42,675	0	35,258	-1,016	0	33,139	37,02
HSO_4^-	43,192	-0,001	36,479	1,329	0	35,585	38,42
LiH	27,367	0	27,367	0	0	26,062	26,93
NaCl	16,884	0	16,884	0	0	37,684	23,82
NaH	35,199	0	35,199	0	0	52,779	41,06
O_2	0	0	0	0	0	0	0
O_3	4,419	0	27,762	0	0	6,946	13,04
PH_3	24,535	0	24,536	0	0	21,563	23,54
PO_4^{3-}	34,821	0	34,821	0	0	34,821	34,82
SH_2	8,139	0	18,976	0	0	17,152	14,76
SiH_4	25,838	0	25,837	0	0	25,837	25,84
SiO_2	16,324	0	16,324	0	0	41,821	24,82
SO_2	10,72	0	37,477	0	0	16,6	21,6
SO_4^{2-}	35,543	0	35,543	0	0	35,543	35,54

Tabela 111: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-opt/6-311G+

B3LYP-opt/6-311G+							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	19,509	0	19,509	0	0	19,509	19,51
BH ₄ ⁻	30,052	0	30,052	0	0	30,052	30,05
CO ₃ ⁻²	51,619	0	51,619	0	0	29,01	44,08
HCO ₃ ⁻	37,358	-2,64	35,156	0	0	19,208	30,57
NO ₂ ⁻	15,401	0	37,388	0	0	21,875	24,89
NO ₃ ⁻	35,398	0	35,399	0	0	15,181	28,66
OH ⁻	11,074	0	11,074	0	0	12,452	11,53
AlF ₂ H	15,906	0	24,315	0	0	24,09	21,44
AlF ₃	20,525	0	20,524	0	0	13,069	18,04
AlFH ₂	15,838	0	29,694	0	0	26,721	24,08
AlH ₃	33,958	0	33,957	0	0	14,473	27,46
BF ₃	15,407	0	15,407	0	0	9,144	13,32
BH ₃	18,149	0	18,149	0	0	7,713	14,67
C ₂ H ₄ O ₂	32,178	2,022	39,772	-0,005	-0,004	22,654	31,53
C ₃ H ₆ O ₂	46,286	2,514	49,153	0,001	0,001	32,562	42,67
C ₄ H ₆	61,527	-23,146	65,619	0	0	30,717	52,62
C ₄ H ₈ O ₂	60,643	1,06	59,782	-0,001	0,002	42,489	54,3
C ₅ H ₁₀ O ₂	76,039	-2,7	69,916	0,001	-0,001	52,207	66,05
C ₆ H ₅ OCH ₃	106,142	0,001	87,566	-3,297	-0,004	52,951	82,22
C ₆ H ₆	76,754	0	76,756	0	0	39,024	64,18
CF ₄	16,97	0	16,97	0	0	16,97	16,97
CH ₂ F ₂	12,971	0	17,071	0	0	14,551	14,86
CH ₃ F	13,263	0	13,264	0	0	15,349	13,96
CH ₄	13,424	0	13,424	0	0	13,424	13,42
CHF ₃	17,026	0	17,026	0	0	14,051	16,03
CO	9,525	0	9,525	0	0	16,124	11,72
CO ₂	7,926	0	7,926	0	0	28,132	14,66
F ₂	2,66	0	2,66	0	0	12,571	5,96
H ₂	0	0	0	0	0	6,868	2,29
H ₂ CO ₃	14,282	0	28,935	0	0	28,798	24,01
H ₂ PO ₄ ⁻	50,292	0,896	46,363	-3,054	0,579	45,636	47,43
H ₂ SO ₄	0	0	0	0	0	0	0
H ₃ PO ₄	43,042	-2,051	39,755	-1,331	0,435	37,744	40,18
HCl	43,042	-2,051	39,755	-1,331	0,435	37,744	40,18
HF	2,054	0	2,054	0	0	5,249	3,12
HPO ₄ ⁻²	62,479	0	60,781	-1,768	0	57,453	60,24
HSO ₄ ⁻	53,289	-0,003	49,772	1,133	0,002	48,542	50,53
LiH	27,555	0	27,555	0	0	26,282	27,13
NaCl	17,918	0	17,918	0	0	39,677	25,17
NaH	35,64	0	35,64	0	0	53,468	41,58
O ₂	0	0	0	0	0	0	0
O ₃	7,885	0	31,871	0	0	10,332	16,7
PH ₃	24,789	0	24,789	0	0	23,248	24,28
PO ₄ ⁻³	91,228	0	91,228	0	0	91,228	91,23
SH ₂	14,955	0	19,148	0	0	17,292	17,13
SiH ₄	26,486	0	26,485	0	0	26,485	26,48
SiO ₂	17,978	0	17,978	0	0	49,062	28,34
SO ₂	13,967	0	43,203	0	0	20,583	25,92
SO ₄ ⁻²	60,004	0	60,004	0	0	60,004	60

Tabela 112: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-opt/cc-pVDZ

B3LYP-opt/cc-pVDZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	14,081	0	14,081	0	0	14,081	14,08
BH ₄ ⁻	24,924	0	24,924	0	0	24,924	24,92
CO ₃ ⁻²	21,451	0	21,451	0	0	11,29	18,06
HCO ₃ ⁻	24,102	-3,253	23,83	0	0	11,014	19,65
NO ₂ ⁻	6,664	0	22,841	0	0	9,193	12,9
NO ₃ ⁻	22,346	0	22,346	0	0	7,411	17,37
OH ⁻	3,584	0	3,584	0	0	10,076	5,75
AlF ₂ H	17,557	0	20,165	0	0	21,53	19,75
AlF ₃	17,209	0	17,206	0	0	13,839	16,08
AlFH ₂	19,708	0	26,507	0	0	22,923	23,05
AlH ₃	29,712	0	29,71	0	0	20,605	26,68
BF ₃	12,935	0	12,935	0	0	8,371	11,41
BH ₃	17,671	0	17,671	0	0	9,875	15,07
C ₂ H ₄ O ₂	28,951	1,936	33,164	0	-0,001	19,668	27,26
C ₃ H ₆ O ₂	42,032	2,159	43,145	0,001	0,001	29,427	38,2
C ₄ H ₆	59,405	-20,506	63,995	0	0	18,916	47,44
C ₄ H ₈ O ₂	56,284	1,152	53,332	0,001	0,001	39,132	49,58
C ₅ H ₁₀ O ₂	71,683	-2,584	63,033	0,001	-0,001	48,56	61,09
C ₆ H ₅ OCH ₃	101,521	0,002	84,489	-4,284	-0,007	38,803	74,94
C ₆ H ₆	75,108	0	75,109	0	0	24,475	58,23
CF ₄	12,48	0	12,48	0	0	12,48	12,48
CH ₂ F ₂	12,551	0	13,319	0	0	12,846	12,91
CH ₃ F	13,04	0	13,04	0	0	13,364	13,15
CH ₄	13,416	0	13,416	0	0	13,416	13,42
CHF ₃	12,985	0	12,986	0	0	12,212	12,73
CO	8,249	0	8,249	0	0	12,486	9,66
CO ₂	7,607	0	7,607	0	0	21,442	12,22
F ₂	1,5	0	1,5	0	0	9,638	4,21
H ₂	1,191	0	1,191	0	0	6,726	3,04
H ₂ CO ₃	10,593	0	24,897	0	0	21,558	19,02
H ₂ PO ₄ ⁻	29,911	0,008	34,102	0	-0,688	26,67	30,23
H ₂ SO ₄	30,019	-1,272	27,183	-0,605	1,2	27,631	28,28
H ₃ PO ₄	31,471	-0,457	28,449	-1,53	-0,573	28,171	29,36
HCl	31,471	-0,457	28,449	-1,53	-0,573	28,171	29,36
HF	1,632	0	1,632	0	0	4,366	2,54
HPO ₄ ⁻²	34,478	0	28,567	-0,782	0	28,031	30,36
HSO ₄ ⁻	30,39	-0,005	26,553	1,592	0	26,421	27,79
LiH	31,269	0	31,269	0	0	24,13	28,89
NaCl	22,242	0	22,242	0	0	34,875	26,45
NaH	38,262	0	38,262	0	0	52,557	43,03
O ₂	0	0	0	0	0	0	0
O ₃	4,789	0	24,398	0	0	6,925	12,04
PH ₃	24,45	0	24,451	0	0	21,425	23,44
PO ₄ ⁻³	28,201	0	28,201	0	0	28,201	28,2
SH ₂	9,654	0	18,593	0	0	17,134	15,13
SiH ₄	26,94	0	26,94	0	0	26,939	26,94
SiO ₂	18,184	0	18,184	0	0	33,966	23,44
SO ₂	11,694	0	28,635	0	0	15,091	18,47
SO ₄ ⁻²	25,781	0	25,781	0	0	25,781	25,78

Tabela 113: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-opt/aug-cc-pVDZ

B3LYP-opt/aug-cc-pVDZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	24,345	0	24,345	0	0	24,345	24,35
BH ₄ ⁻	40,711	0	40,711	0	0	40,711	40,71
CO ₃ ⁻²	59,793	0	59,79	0	0	39,524	53,04
HCO ₃ ⁻	39,308	-1,873	39,617	0	0	24,908	34,61
NO ₂ ⁻	20,287	0	39,717	0	0	29,436	29,81
NO ₃ ⁻	37,018	0	37,018	0	0	20,517	31,52
OH ⁻	24,914	0	24,914	0	0	18,344	22,72
AlF ₂ H	22,042	0	25,042	0	0	26,045	24,38
AlF ₃	21,832	0	21,826	0	0	18,521	20,73
AlFH ₂	25,045	0	31,565	0	0	28,233	28,28
AlH ₃	35,707	0	35,708	0	0	28,1	33,17
BF ₃	17,486	0	17,487	0	0	13,252	16,08
BH ₃	19,549	0	19,543	0	0	14,747	17,95
C ₂ H ₄ O ₂	37,314	1,66	40,331	0	-0,001	26,747	34,8
C ₃ H ₆ O ₂	52,316	1,808	51,043	0	0,002	37,063	46,81
C ₄ H ₆	65,17	-21,854	71,835	0	0	37,435	58,15
C ₄ H ₈ O ₂	68,586	0,595	62,191	0,001	0,001	47,358	59,38
C ₅ H ₁₀ O ₂	85,635	-2,401	73,191	0,002	-0,001	57,483	72,1
C ₆ H ₅ OCH ₃	112,787	0,002	94,079	-2,58	-0,005	59,769	88,88
C ₆ H ₆	82,849	0	82,851	0	0	45,029	70,24
CF ₄	19,113	0	19,113	0	0	19,113	19,11
CH ₂ F ₂	16,652	0	19,16	0	0	17,774	17,86
CH ₃ F	16,639	0	16,639	0	0	18,468	17,25
CH ₄	17,193	0	17,193	0	0	17,193	17,19
CHF ₃	19,125	0	19,126	0	0	17,606	18,62
CO	11,76	0	11,76	0	0	15,511	13,01
CO ₂	12,195	0	12,195	0	0	26,178	16,86
F ₂	5,435	0	5,435	0	0	12,071	7,65
H ₂	4,629	0	4,629	0	0	7,224	5,49
H ₂ CO ₃	18,725	0	30,954	0	0	29,662	26,45
H ₂ PO ₄ ⁻	47,447	0,023	50,903	-0,002	-0,232	46,063	48,14
H ₂ SO ₄	0	0	0	0	0	0	0
H ₃ PO ₄	41,515	-0,418	39,269	-1,32	-0,184	39,609	40,13
HCl	41,515	-0,418	39,269	-1,32	-0,184	39,609	40,13
HF	4,483	0	4,483	0	0	6,516	5,16
HPO ₄ ⁻²	70,098	0	63,632	1,212	0	63,418	65,72
HSO ₄ ⁻	46,69	-0,736	43,997	0,038	0,022	44,42	45,04
LiH	31,319	0	31,319	0	0	28,21	30,28
NaCl	28,539	0	28,539	0	0	39,609	32,23
NaH	38,064	0	38,064	0	0	59,532	45,22
O ₂	0	0	0	0	0	0	0
O ₃	10,829	0	30,367	0	0	13,145	18,11
PH ₃	30,468	0	30,468	0	0	31,746	30,89
PO ₄ ⁻³	103,49	0	103,49	0	0	103,49	103,49
SH ₂	24,149	0	24,103	0	0	23,795	24,02
SiH ₄	32,623	0	32,622	0	0	32,622	32,62
SiO ₂	24,317	0	24,317	0	0	41,719	30,12
SO ₂	18,89	0	36,372	0	0	23,357	26,21
SO ₄ ⁻²	56,671	0	56,671	0	0	56,671	56,67

Tabela 114: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-opt/cc-pVTZ

B3LYP-opt/cc-pVTZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	18,262	0	18,262	0	0	18,262	18,26
BH ₄ ⁻	29,694	0	29,694	0	0	29,694	29,69
CO ₃ ⁻²	28,157	0	28,157	0	0	16,958	24,42
HCO ₃ ⁻	28,78	-2,705	28,697	0	0	15,847	24,44
NO ₂ ⁻	9,898	0	26,571	0	0	12,924	16,46
NO ₃ ⁻	26,444	0	26,443	0	0	11,494	21,46
OH ⁻	6,86	0	6,86	0	0	11,744	8,49
AlF ₂ H	20,1	0	22,253	0	0	23,618	21,99
AlF ₃	19,007	0	19,002	0	0	16,39	18,13
AlFH ₂	22,783	0	28,749	0	0	25,265	25,6
AlH ₃	32,119	-0,001	32,118	0	0	25,074	29,77
BF ₃	15,102	0	15,103	0	0	10,894	13,7
BH ₃	18,444	0	18,443	0	0	12,21	16,37
C ₂ H ₄ O ₂	32,813	1,804	36,222	0	-0,001	23,237	30,76
C ₃ H ₆ O ₂	47,091	1,908	46,767	0,001	0,001	33,336	42,4
C ₄ H ₆	60,993	-20,915	66,386	0	0	26,929	51,44
C ₄ H ₈ O ₂	62,582	0,792	57,39	0,001	0,001	43,341	54,44
C ₅ H ₁₀ O ₂	79,002	-2,427	67,759	0,001	-0,001	53,097	66,62
C ₆ H ₅ OCH ₃	105,883	0,002	87,898	-3,295	-0,006	48,718	80,83
C ₆ H ₆	77,275	0	77,276	0	0	33,807	62,79
CF ₄	15,645	0	15,645	0	0	15,645	15,65
CH ₂ F ₂	14,337	0	15,929	0	0	15,102	15,12
CH ₃ F	14,779	0	14,779	0	0	15,526	15,03
CH ₄	15,271	0	15,271	0	0	15,271	15,27
CHF ₃	15,848	0	15,848	0	0	14,572	15,42
CO	10,119	0	10,119	0	0	13,874	11,37
CO ₂	9,916	0	9,916	0	0	23,462	14,43
F ₂	2,907	0	2,907	0	0	10,567	5,46
H ₂	2,611	0	2,611	0	0	6,859	4,03
H ₂ CO ₃	14,617	0	27,418	0	0	25,252	22,43
H ₂ PO ₄ ⁻	34,99	0,005	38,488	-0,001	-0,382	32,683	35,39
H ₂ SO ₄	0	0	0	0	0	0	0
H ₃ PO ₄	34,574	0,132	32,889	-1,518	-0,462	32,335	33,27
HCl	34,574	0,132	32,889	-1,518	-0,462	32,335	33,27
HF	2,778	0	2,778	0	0	5,353	3,64
HPO ₄ ⁻²	40,967	0	35,755	-0,631	0	35,446	37,39
HSO ₄ ⁻	34,435	-1,321	31,597	0,093	-0,003	31,547	32,53
LiH	30,019	0	30,019	0	0	26,325	28,79
NaCl	26,086	0	26,086	0	0	36,996	29,72
NaH	37,47	0	37,47	0	0	55,37	43,44
O ₂	0	0	0	0	0	0	0
O ₃	6,893	0	26,809	0	0	9,167	14,29
PH ₃	27,103	0	27,103	0	0	25,751	26,65
PO ₄ ⁻³	37,226	0	37,226	0	0	37,226	37,23
SH ₂	15,41	0	20,884	0	0	20,078	18,79
SiH ₄	29,677	0	29,677	0	0	29,676	29,68
SiO ₂	21,499	0	21,499	0	0	35,502	26,17
SO ₂	15,05	0	30,463	0	0	18,638	21,38
SO ₄ ⁻²	32,137	0	32,137	0	0	32,137	32,14

Tabela 115: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-opt/aug-cc-pVTZ

B3LYP-opt/aug-cc-pVTZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	24,692	0	24,692	0	0	24,692	24,69
BH ₄ ⁻	41,903	0	41,903	0	0	41,903	41,9
CO ₃ ²⁻	70,806	0	70,801	0	0	44,547	62,05
HCO ₃ ⁻	40,233	-1,774	40,827	0	0	25,888	35,65
NO ₂ ⁻	22,107	0	41,444	0	0	32,516	32,02
NO ₃ ⁻	38,226	0	38,226	0	0	21,634	32,7
OH ⁻	29,375	0	29,375	0	0	21,096	26,62
AlF ₂ H	22,66	0	25,115	0	0	26,418	24,73
AlF ₃	22,225	0	22,22	0	0	19,298	21,25
AlFH ₂	25,355	0	31,606	0	0	28,121	28,36
AlH ₃	35,316	-0,001	35,315	0	0	27,839	32,82
BF ₃	17,542	0	17,543	0	0	13,629	16,24
BH ₃	19,153	0	19,152	0	0	14,598	17,63
C ₂ H ₄ O ₂	37,196	1,537	40	0	-0,001	26,81	34,67
C ₃ H ₆ O ₂	51,994	1,84	50,544	0,001	0,001	36,894	46,48
C ₄ H ₆	63,994	-21,045	70,806	0	0	37,253	57,35
C ₄ H ₈ O ₂	68,046	0,621	61,556	0,001	0,001	47,036	58,88
C ₅ H ₁₀ O ₂	84,926	-2,436	72,409	0,002	-0,001	57,031	71,46
C ₆ H ₅ OCH ₃	111,198	0,002	92,745	-2,523	-0,005	59,355	87,77
C ₆ H ₆	81,618	0	81,619	0	0	44,776	69,34
CF ₄	19,531	0	19,531	0	0	19,531	19,53
CH ₂ F ₂	16,964	0	19,217	0	0	17,972	18,05
CH ₃ F	16,762	0	16,762	0	0	18,375	17,3
CH ₄	17,029	0	17,029	0	0	17,029	17,03
CHF ₃	19,398	0	19,399	0	0	17,988	18,93
CO	12,059	0	12,059	0	0	15,467	13,19
CO ₂	12,749	0	12,749	0	0	26,022	17,17
F ₂	6,156	0	6,156	0	0	12,418	8,24
H ₂	4,915	0	4,915	0	0	6,807	5,55
H ₂ CO ₃	19,113	0	31,186	0	0	29,702	26,67
H ₂ PO ₄ ⁻	46,831	-0,008	49,626	0,001	-0,117	45,382	47,28
H ₂ SO ₄	0	0	0	0	0	0	0
H ₃ PO ₄	39,994	0,3	38,79	-1,218	-0,434	38,266	39,02
HCl	39,994	0,3	38,79	-1,218	-0,434	38,266	39,02
HF	5,085	0	5,085	0	0	6,602	5,59
HPO ₄ ⁻²	72,12	0	65,98	0,633	0	65,349	67,82
HSO ₄ ⁻	45,177	-0,78	42,785	0,006	0,004	43,193	43,72
LiH	30,569	0	30,569	0	0	28,61	29,92
NaCl	30,249	0	30,249	0	0	40,558	33,69
NaH	37,927	0	37,927	0	0	58,133	44,66
O ₂	0	0	0	0	0	0	0
O ₃	11,516	0	30,754	0	0	13,728	18,67
PH ₃	30,587	0	30,587	0	0	32,341	31,17
PO ₄ ⁻³	129,817	0	129,817	0	0	129,817	129,82
SH ₂	25,55	0	24,832	0	0	24,717	25,03
SiH ₄	32,115	0	32,115	0	0	32,115	32,12
SiO ₂	25,19	0	25,19	0	0	40,115	30,16
SO ₂	19,535	0	34,764	0	0	23,357	25,89
SO ₄ ⁻²	57,715	0	57,715	0	0	57,715	57,72

Tabela 116: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores B3LYP-opt/pc-3

B3LYP-opt/pc-3							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	23,645	0	23,645	0	0	23,645	23,64
BH ₄ ⁻	37,45	0	37,45	0	0	37,45	37,45
CO ₃ ⁻²	51,237	-0,001	51,237	0	0	34,565	45,68
HCO ₃ ⁻	38,224	-1,826	38,378	0	0	24,005	33,54
NO ₂ ⁻	17,544	0	37,148	0	0	24,732	26,47
NO ₃ ⁻	35,842	0	35,843	0	0	19,624	30,44
OH ⁻	20,077	0	20,077	0	0	16,104	18,75
AlF ₂ H	21,432	0	25,608	0	0	24,267	23,77
AlF ₃	21,338	0	21,332	0	0	18,195	20,29
AlFH ₂	23,239	0	30,937	0	0	27,321	27,17
AlH ₃	34,749	0	34,747	0	0	24,254	31,25
BF ₃	17,232	0	17,236	0	0	13,248	15,91
BH ₃	18,99	0	18,99	0	0	13,597	17,19
C ₂ H ₄ O ₂	36,687	1,612	39,568	0	-0,001	26,384	34,21
C ₃ H ₆ O ₂	51,492	1,786	50,183	0,001	0,001	36,543	46,07
C ₄ H ₆	63,54	-21,465	69,88	0	0	36,375	56,6
C ₄ H ₈ O ₂	67,565	0,566	61,18	0,001	0,001	46,711	58,49
C ₅ H ₁₀ O ₂	84,417	2,377	72,037	0,001	0,001	56,706	71,05
C ₆ H ₅ OCH ₃	110,545	0,001	92,252	-2,57	-0,002	58,868	87,22
C ₆ H ₆	80,902	0	80,903	0	0	44,225	68,68
CF ₄	19,109	0	19,109	0	0	19,109	19,11
CH ₂ F ₂	16,48	0	18,839	0	0	17,563	17,63
CH ₃ F	16,392	0	16,392	0	0	17,892	16,89
CH ₄	16,662	0	16,662	0	0	16,662	16,66
CHF ₃	19,02	0	19,021	0	0	17,517	18,52
CO	11,68	0	11,68	0	0	15,349	12,9
CO ₂	12,16	0	12,16	0	0	25,938	16,75
F ₂	5,515	0	5,515	0	0	12,19	7,74
H ₂							
H ₂ CO ₃	18,57	0	30,481	0	0	29,41	26,15
H ₂ PO ₄ ⁻	43,857	0,002	46,822	0	-0,321	42,384	44,35
H ₂ SO ₄	35,246	0,001	37,664	-0,001	-0,508	33,902	35,6
H ₃ PO ₄	38,615	0,31	37,417	-1,37	-0,427	37,084	37,71
HCl	13,761	0	13,761	0	0	17,124	14,88
HF	4,648	0	4,648	0	0	6,352	5,22
HPO ₄ ⁻²	59,198	0,001	54,372	-0,377	0	54,007	55,86
HSO ₄ ⁻	42,107	-0,759	40,08	0,189	0,056	40,142	40,78
LiH	27,944	0	27,944	0	0	28,1	28
NaCl	24,036	0	24,036	0	0	39,212	29,09
NaH	0	0	0	0	0	0	0
O ₂	7,724	0	7,072	0	0	14,065	9,62
O ₃	10,629	0	30,157	0	0	12,895	17,89
PH ₃	29,085	0	29,085	0	0,007	29,861	29,34
PO ₄ ⁻³	71,592	0	71,592	0	0	71,592	71,59
SH ₂	22,683	0	22,53	0	0	22,328	22,51
SiH ₄	30,815	0	30,814	0	0	30,814	30,81
SiO ₂	22,999	0	22,999	0	0	39,481	28,49
SO ₂	18,14	0	33,128	0	0	21,751	24,34
SO ₄ ⁻²	48,481	0	48,481	0	0	48,481	48,48

Tabela 117: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BLYP/MCG

BLYP/MCG							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF_4^-	22,379	0	22,379	0	0	22,379	22,38
BH_4^-	35,175	0	35,175	0	0	35,175	35,18
CO_3^{2-}							
HCO_3^-	36,355	-2,654	37,788	0	0	20,897	31,68
NO_2^-	13,95	0	34,812	0	0	21,07	23,28
NO_3^-	34,54	0	34,547	0	0	15,75	28,28
OH^-	13,075	0	13,075	0	0	15,309	13,82
AlF_2H	22,526	0	27,253	0	0	25,872	25,22
AlF_3	22,868	0	22,868	0	0	19,222	21,65
AlFH_2	24,79	0	28,728	0	0	32,343	28,62
AlH_3	35,764	0	35,765	0	0	26,621	32,72
BF_3	17,346	0	17,348	0	0	12,293	15,66
BH_3	19,469	0	19,469	0	0	12,001	16,98
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	37,322	1,633	41,227	0	0	26,053	34,87
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	53,169	-2,16	52,008	0	0	36,703	47,29
C_4H_6	48,239	11,355	87,608	0	0	33,392	56,41
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	69,897	-1,384	63,609	0	0	47,318	60,27
$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$	80,745	7,204	81,735	0	0	57,668	73,38
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$	114,289	0,005	94,031	-2,692	-0,011	57,549	88,62
C_6H_6	81,979	-0,001	81,981	0	0	41,611	68,52
CF_4	18,375	0	18,375	0	0	18,375	18,38
CH_2F_2	15,664	0	18,636	0	0	17,048	17,12
CH_3F	15,962	0	15,962	0	0	17,432	16,45
CH_4	16,417	0	16,417	0	0	16,417	16,42
CHF_3	18,588	0	18,588	0	-0,001	16,602	17,93
CO	10,756	0	10,756	0	0	15,816	12,44
CO_2	10,659	0	10,659	0	0	26,962	16,09
F_2	3,623	0	3,623	0	0	11,563	6,27
H_2	2,844	0	2,844	0	0	7,057	4,25
H_2CO_3	17,505	0	30,74	0	0	29,082	25,78
H_2PO_4^-	45,419	-0,015	48,417	0	0,226	42,811	45,55
H_2SO_4	36,972	0,542	39,48	-0,21	-0,5	35,229	37,23
H_3PO_4	40,949	-0,347	39,057	-1,444	-0,304	39,301	39,77
HCl	14,088	0	14,088	0	0	16,959	15,05
HF	3,478	0	3,478	0	0	6,028	4,33
HPO_4^{2-}							
HSO_4^-	42,722	-1,183	39,77	0,142	0,086	40,121	40,87
LiH	4,202	0	4,202	0	0	41,276	16,56
NaCl	20,917	0	20,917	0	0	43,881	28,57
NaH	9,805	0	9,805	0	0	58,399	26
O_2							
O_3	9,56	0	30,404	0	0	12,298	17,42
PH_3	29,728	0	29,723	0	0,002	30,384	29,94
PO_4^{3-}							
SH_2	20,464	0	22,511	0	0	22,124	21,7
SiH_4	32,407	0	32,406	0	0,001	32,406	32,41
SiO_2	25,291	0	25,291	0	0	42,547	31,04
SO_2	17,485	0	34,851	0	0	21,968	24,77
SO_4^{2-}	44,061	0	44,061	0	0	44,061	44,06

Tabela 118: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BLYP/aMCG-2d1f

BLYP/aMCG-2d1f							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF_4^-	26,275	0	26,275	0	0	26,275	26,27
BH_4^-	42,563	0	42,563	0	0	42,563	42,56
HCO_3^-	44,382	-1,793	45,801	0,001	0	26,744	38,98
NO_2^-	23,525	0	50,208	0	0	42,68	38,8
NO_3^-	42,071	0	42,076	0	0	21,548	35,23
OH^-	91,565	0	91,565	0	0	14,934	66,02
AlF_2H	19,921	0	26,148	0	0	26,534	24,2
AlF_3	22,536	0	22,538	0	0	17,667	20,91
AlFH_2	19,471	0	32,098	0	0	28,93	26,83
AlH_3	36,11	0	36,115	0	0	18,068	30,1
BF_3	18,477	0	18,48	0	0	13,758	16,9
BH_3	19,794	0	19,794	0	0	13,641	17,74
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	38,157	1,748	42,115	0	0	26,782	35,68
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	54,054	-2,113	52,778	0	0	37,368	48,07
C_4H_6	47,621	11,452	88,334	0	0	35,467	57,14
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	70,653	-1,338	64,625	0	0	48,04	61,11
$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$	81,623	6,997	82,722	0	0	58,465	74,27
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$	114,638	0,004	94,674	-2,806	-0,01	59,583	89,63
C_6H_6	81,976	0	81,973	-0,001	0,002	43,893	69,28
CF_4	20,167	0	20,167	0	0	20,167	20,17
CH_2F_2	16,63	0	19,421	0	0	17,764	17,94
CH_3F	16,349	0	16,349	0	0	17,509	16,74
CH_4	15,932	0	15,932	0	0	15,932	15,93
CHF_3	19,956	0	19,956	0	-0,001	18,002	19,3
CO	11,127	0	11,127	0	0	16,341	12,86
CO_2	10,99	0	10,99	0	0	27,704	16,56
F_2	5,317	0	5,317	0	0	12,348	7,66
H_2	2,072	0	2,072	0	0	7,155	3,77
H_2CO_3	17,628	0	29,358	0	0	29,027	25,34
H_2PO_4^-	49,417	0,002	53,118	-0,002	-0,01	48,195	50,24
H_2SO_4	38,023	0,5	40,534	-0,2	-0,49	36,632	38,4
H_3PO_4	38,977	0	38,973	0	0,001	46,084	41,34
HCl	12,061	0	12,061	0	0	15,207	13,11
HF	4,196	0	4,196	0	0	6,031	4,81
HSO_4^-	47,671	-0,799	45,302	0,105	0,11	45,877	46,28
LiH	2,682	0	2,682	0	0	46,175	17,18
NaCl	23,506	0	23,506	0	0	47,349	31,45
NaH	26,865	0	26,865	0	0	63,934	39,22
O_3	10,775	0	31,648	0	0	13,687	18,7
PH_3	26,58	0	26,577	0	0,003	26,688	26,62
SH_2	20,649	0	19,59	0	0	19,006	19,75
SiH_4	28,985	0	28,987	-0,002	0,002	28,989	28,99
SiO_2	21,467	0	21,467	0	0	44,397	29,11
SO_2	17,66	0	36,642	0	0	22,092	25,46
SO_4^{2-}	71,404	0	71,404	0	0	71,404	71,4

Tabela 119: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BLYP/aMCG-3d2f1g

BLYP/aMCG-3d2f1g							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizability
BF_4^-	27,043	0	27,043	0	0	27,043	27,04
BH_4^-	43,058	0	43,058	0	0	43,058	43,06
CO_3^{2-}	0	0	0	0	0	0	0
HCO_3^-	45,463	-1,581	48,033	0	0,001	28,909	40,8
NO_2^-	25,499	0	51,364	0	0	44,473	40,45
NO_3^-	43,626	0	43,627	0	0	23,809	37,02
OH^-	92,135	0	92,135	0	0	18,729	67,67
AlF_2H	23,029	0	28,001	0	0	26,856	25,96
AlF_3	23,918	0	23,916	0	0	20,268	22,7
AlFH_2	24,288	0	29,754	0	0	33,124	29,06
AlH_3	36,899	0	36,9	0	0	24,724	32,84
BF_3	18,835	0	18,838	0	0	14,443	17,37
BH_3	19,862	0	19,862	0	0	14,054	17,93
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	39,663	1,271	42,81	0	0	28,016	36,83
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	54,664	-2,35	54,478	0	0	38,489	49,21
C_4H_6	50,292	11,687	88,848	0	0	37,953	59,03
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	72,432	-1,767	65,348	0	0	49,069	62,28
$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$	83,204	7,74	83,908	0	0	59,469	75,53
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$	116,918	0,005	96,24	-2,384	-0,01	61,372	91,51
C_6H_6	84,061	-0,007	84,054	-0,004	-0,007	45,626	71,25
CF_4	21,111	0	21,111	0	0	21,111	21,11
CH_2F_2	17,766	0	20,638	0	0	18,935	19,11
CH_3F	17,383	0	17,382	0	0	19,22	17,99
CH_4	17,449	0	17,449	0	0	17,449	17,45
CHF_3	20,941	0	20,943	0	-0,001	19,109	20,33
CO	12,27	0	12,27	0	0	16,207	13,58
CO_2	13,067	0	13,067	0	0	27,522	17,89
F_2	6,618	0	6,618	0	0	12,998	8,74
H_2	4,42	0	4,42	0	0	7,108	5,32
H_2CO_3	19,926	0	32,944	0	0	31,073	27,98
H_2PO_4^-	52,047	-0,012	54,65	0,002	0,301	50,13	52,28
H_2SO_4	39,64	0,423	41,47	-0,15	-0,25	37,751	39,62
H_3PO_4	42,941	-0,272	41,189	-1,311	-0,316	41,374	41,83
HCl	16,115	0	16,115	0	0	18,218	16,82
HF	5,423	0	5,423	0	0	6,897	5,91
HPO_4^{2-}	0	0	0	0	0	0	0
HSO_4^-	49,662	-0,617	46,722	0,072	0,087	47,149	47,84
LiH	11,925	0	11,925	0	0	39,833	21,23
NaCl	27,566	0	27,566	0	0	47,233	34,12
NaH	27,984	0	27,984	0	0	64,624	40,2
O_2	0	0	0	0	0	0	0
O_3	12,113	0	32,168	0	0	14,84	19,71
PH_3	30,091	0	30,087	0	0,003	31,449	30,54
PO_4^{3-}	0	0	0	0	0	0	0
SH_2	24,551	0	22,981	0	0	23,089	23,54
SiH_4	32,365	0	32,364	0,001	0,001	32,364	32,36
SiO_2	25,424	0	25,424	0	0	43,958	31,6
SO_2	19,802	0	36,449	0	0	24,013	26,75
SO_4^{2-}	71,293	0	71,293	0	0	71,293	71,29

Tabela 120: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BLYP/6-311G

BLYP/6-311G							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF_4^-	13,973	0	13,973	0	0	13,973	13,97
BH_4^-	26,793	0	26,793	0	0	26,793	26,79
CO_3^{2-}							
HCO_3^-	26,825	-3,924	27,209	0	0	11,065	21,7
NO_2^-	6,755	0	24,545	0	0	9,302	13,53
NO_3^-	24,634	0	24,633	0	0	7,256	18,84
OH^-	4,406	0	4,406	0	0	10,888	6,57
AlF_2H	14,752	0	22,953	0	0	21,519	19,74
AlF_3	18,219	0	18,222	0	0	11,541	15,99
AlFH_2	15,952	0	24,868	0	0	29,344	23,39
AlH_3	33,332	0	33,332	0	0	15,19	27,28
BF_3	13,564	0	13,565	0	0	7,476	11,54
BH_3	18,351	0	18,352	0	0	8,049	14,92
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	30,416	2,851	35,339	0	0	19,895	28,55
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	46,845	-1,63	42,102	0	0	29,977	39,64
C_4H_6	43,158	10,069	80,872	0	0	19,725	47,92
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	58,443	0,766	55,403	0	0	39,904	51,25
$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$	68,107	4,349	71,293	0	0	49,545	62,98
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$	103,832	0,005	84,751	-4,098	-0,015	40,391	76,32
C_6H_6	74,896	0,001	74,896	0	0	25,646	58,48
CF_4	13,193	0	13,193	0	0	13,193	13,19
CH_2F_2	12,011	0	14,082	0	0	12,849	12,98
CH_3F	12,715	0	12,715	0	0	13,469	12,97
CH_4	13,24	0	13,24	0	0	13,24	13,24
CHF_3	13,752	0	13,752	0	0	11,956	13,15
CO	8,426	0	8,426	0	0	13,671	10,17
CO_2	6,959	0	6,959	0	0	24,079	12,67
F_2	0,977	0	0,977	0	0	10,078	4,01
H_2	0	0	0	0	0	7,025	2,34
H_2CO_3	10,329	0	26,303	0	0	22,959	19,86
H_2PO_4^-	34,005	-0,028	39,469	0,002	0,115	30,304	34,59
H_2SO_4	31,304	0,971	35,502	-0,363	-0,603	28,844	31,88
H_3PO_4	34,163	-0,646	31,27	-2,342	-0,256	31,325	32,25
HCl	4,063	0	4,063	0	0	13,098	7,07
HF	1,128	0	1,128	0	0	4,735	2,33
HPO_4^{2-}							
HSO_4^-	35,357	-1,865	30,602	0,204	0,009	30,274	32,08
LiH	31,379	0	31,379	0	0	30,053	30,94
NaCl	19,891	0	19,891	0	0	45,801	28,53
NaH	39,27	0	39,27	0	0	59,869	46,14
O_2							
O_3	4,569	0	25,682	0	0	6,839	12,36
PH_3	23,983	0	23,98	0	0,003	22,4	23,45
PO_4^{3-}							
SH_2	8,742	0	17,847	0	0	17,113	14,57
SiH_4	26,243	0	26,242	0	0	26,241	26,24
SiO_2	16,661	0	16,661	0	0	40,421	24,58
SO_2	11,688	0	32,364	0	0	14,757	19,6
SO_4^{2-}	29,888	0	29,888	0	0	29,888	29,89

Tabela 121: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BLYP/6-311G+

BLYP/6-311G+							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF_4^-	21,236	0	21,236	0	0	21,236	21,24
BH_4^-	32,111	0	32,111	0	0	32,111	32,11
CO_3^{2-}							
HCO_3^-	39,175	-2,271	38,832	0	0	20,81	32,94
NO_2^-	17,8	0	39,381	0	0	25,857	27,68
NO_3^-	36,401	0	36,413	0	0	16,237	29,68
OH^-	12,417	0	12,417	0	0	12,63	12,49
AlF_2H	17,243	0	25,305	0	0	25,353	22,63
AlF_3	21,404	0	21,407	0	0	14,39	19,07
AlFH_2	16,937	0	27,965	0	0	30,738	25,21
AlH_3	35,015	0	35,016	0	0	15,345	28,46
BF_3	16,309	0	16,311	0	0	9,849	14,16
BH_3	18,762	0	18,762	0	0	8,103	15,21
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	35,192	2,822	40,413	0	0	23,654	33,09
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	52,025	-1,617	48,092	0	0	33,821	44,65
C_4H_6	44,818	11,013	86,043	0	0	31,652	54,17
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	64,855	0,039	61,488	0	0	44,048	56,8
$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$	75,224	4,74	77,84	0	0	54,043	69,04
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$	109,931	0,003	90,42	-3,393	-0,011	54,609	84,99
C_6H_6	78,981	-0,006	78,978	0,011	-0,01	40,035	66
CF_4	17,356	0	17,356	0	0	17,356	17,36
CH_2F_2	13,877	0	17,15	0	0	15,255	15,43
CH_3F	13,918	0	13,917	0	0	15,375	14,4
CH_4	13,875	0	13,875	0	0	13,875	13,87
CHF_3	17,419	0	17,42	0	-0,001	15,125	16,65
CO	9,997	0	9,997	0	0	16,426	12,14
CO_2	8,246	0	8,246	0	0	28,243	14,91
F_2	2,885	0	2,885	0	0	11,507	5,76
H_2	0	0	0	0	0	7,025	2,34
H_2CO_3	14,931	0	29,627	0	0	29,088	24,55
H_2PO_4^-	44,057	-0,03	50,236	0,004	-0,302	43,38	45,89
H_2SO_4	36,366	0,841	40,64	-0,349	-0,767	35,327	37,44
H_3PO_4	39,895	-0,68	37,509	-2,513	0,144	38,138	38,51
HCl	6,977	0	6,977	0	0	13,323	9,09
HF	2,262	0	2,262	0	0	5,345	3,29
HPO_4^{2-}							
HSO_4^-	44,471	-1,451	42,258	0,2	0,183	43,182	43,3
LiH	31,726	0	31,726	0	0	30,45	31,3
NaCl	20,977	0	20,977	0	0	48,341	30,1
NaH	40,012	0	40,012	0	0	60,914	46,98
O_2							
O_3	8,213	0	30,256	0	0	10,862	16,44
PH_3	24,317	0	24,312	0	0,004	24,141	24,26
PO_4^{3-}							
SH_2	16,466	0	18,05	0	0	17,258	17,26
SiH_4	26,99	0	26,99	0	0	26,989	26,99
SiO_2	18,34	0	18,34	0	0	47,764	28,15
SO_2	14,717	0	37,539	0	0	18,726	23,66
SO_4^{2-}	54,736	0	54,736	0	0	54,736	54,74

Tabela 122: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BLYP/cc-pVDZ

BLYP/cc-pVDZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF_4^-	14,932	0	14,932	0	0	14,932	14,93
BH_4^-	24,93	0	24,93	0	0	24,93	24,93
HCO_3^-	25,071	-3,491	26,206	0	0	11,248	20,84
NO_2^-	6,745	0	23,155	0	0	9,265	13,06
NO_3^-	23,173	0	23,172	0	0	7,512	17,95
OH^-	3,858	0	3,858	0	0	10,021	5,91
AlF_2H	18,78	0	22,622	0	0	21,162	20,85
AlF_3	18,227	0	18,227	0	0	15,15	17,2
AlFH_2	20,675	0	23,874	0	0	27,277	23,94
AlH_3	30,426	0	30,425	0	0	21,206	27,35
BF_3	13,667	0	13,669	0	0	8,841	12,06
BH_3	17,516	0	17,516	0	0	9,981	15
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	30,582	2,02	34,29	0	0	19,886	28,25
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	45,617	-2,046	43,011	0	0	29,749	39,46
C_4H_6	44,499	10,239	80,411	0	0	18,939	47,95
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	59,547	-0,213	54,335	0	0	39,522	51,13
$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$	68,886	6,027	70,951	0	0	49,024	62,95
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$	105,128	0,006	85,82	-3,915	-0,016	39,232	76,73
C_6H_6	76,054	0	76,054	0	0	24,502	58,87
CF_4	13,213	0	13,213	0	0	13,213	13,21
CH_2F_2	12,738	0	14,106	0	0	13,204	13,35
CH_3F	13,103	0	13,103	0	0	13,804	13,34
CH_4	13,414	0	13,414	0	0	13,414	13,41
CHF_3	13,746	0	13,747	0	0	12,602	13,36
CO	8,342	0	8,342	0	0	12,61	9,76
CO_2	7,79	0	7,79	0	0	21,9	12,49
F_2	1,5	0	1,5	0	0	9,57	4,19
H_2	1,188	0	1,188	0	0	6,559	2,98
H_2CO_3	10,754	0	26,238	0	0	21,667	19,55
H_2PO_4^-	31,551	-0,02	35,339	0,001	0,152	27,484	31,46
H_2SO_4	28,4	0,759	31,501	-0,298	-0,558	25,586	28,5
H_3PO_4	32,029	-0,357	29,486	-1,636	-0,806	29,11	30,21
HCl	6,483	0	6,483	0	0	13,457	8,81
HF	1,672	0	1,672	0	0	4,562	2,64
HSO_4^-	30,917	-1,74	26,883	0,184	-0,022	26,39	28,06
LiH	35,197	0	35,197	0	0	28,379	32,92
NaCl	25,55	0	25,55	0	0	44	31,7
NaH	42,407	0	42,407	0	0	61,132	48,65
O_3	4,86	0	24,595	0	0	7,133	12,2
PH_3	24,321	0	24,32	0	0	21,553	23,4
SH_2	9,727	0	18,453	0	0	17,22	15,13
SiH_4	27,153	0	27,151	0	0,001	27,151	27,15
SiO_2	18,928	0	18,928	0	0	35,023	24,29
SO_2	11,826	0	28,125	0	0	14,938	18,3
SO_4^{2-}	25,785	0	25,785	0	0	25,785	25,78

Tabela 123: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BLYP/aug-cc-pVDZ

BLYP/aug-cc-pVDZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF_4^-	26,72	0	26,72	0	0	26,72	26,72
BH_4^-	44,085	0	44,085	0	0	44,085	44,09
CO_3^{2-}							
HCO_3^-	42,737	-1,773	46	0	0	27,117	38,62
NO_2^-	22,32	0	44,74	0	0	33,705	33,59
NO_3^-	40,5	0	40,509	0	0	22,08	34,36
OH^-	31,948	0	31,948	0	0	19,986	27,96
AlF_2H	23,369	0	27,801	0	0	26,78	25,98
AlF_3	23,675	0	23,675	0	0	20,079	22,48
AlFH_2	26,102	0	29,808	0	0	33,117	29,68
AlH_3	37,127	0	37,129	0	0	28,905	34,39
BF_3	18,692	0	18,697	0	0	14,034	17,14
BH_3	19,934	0	19,952	0	0	15,018	18,3
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	39,567	1,25	42,948	0	0	27,767	36,76
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	54,725	-2,295	54,506	0	0	38,332	49,19
C_4H_6	50,95	11,754	89,258	0	0	38,126	59,44
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	72,442	-1,792	65,464	0	0	48,911	62,27
$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$	83,313	7,694	83,972	0	0	59,309	75,53
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$	117,335	0,005	96,482	-2,358	-0,01	61,406	91,74
C_6H_6	84,552	-0,001	84,554	0,005	-0,008	45,435	71,51
CF_4	20,47	0	20,47	0	0	20,47	20,47
CH_2F_2	17,404	0	20,463	0	0	18,754	18,87
CH_3F	17,221	0	17,221	0	0	19,391	17,94
CH_4	17,609	0	17,609	0	0	17,609	17,61
CHF_3	20,488	0	20,491	0	-0,001	18,645	19,87
CO	12,187	0	12,187	0	0	16,091	13,49
CO_2	12,679	0	12,679	0	0	27,214	17,52
F_2	5,747	0	5,747	0	0	12,441	7,98
H_2	4,603	0	4,603	0	0	7,285	5,5
H_2CO_3	19,511	0	32,764	0	0	30,784	27,69
H_2PO_4^-	51,372	-0,016	54,241	0,002	0,251	49,458	51,69
H_2SO_4	39,552	0,481	41,669	-0,183	-0,291	37,607	39,61
H_3PO_4	43,101	-0,296	41,197	-1,471	-0,291	41,476	41,92
HCl	16,078	0	16,078	0	0	18,491	16,88
HF	4,83	0	4,83	0	0	6,994	5,55
HPO_4^{2-}							
HSO_4^-	48,914	-0,643	45,937	0,076	0,062	46,194	47,01
LiH	34,581	0	34,581	0	0	33,062	34,07
NaCl	31,518	0	31,518	0	0	48,233	37,09
NaH	41,541	0	41,541	0	0	69,296	50,79
O_2							
O_3	11,295	0	31,73	0	0	14,163	19,06
PH_3	30,841	0	30,836	0	0,003	32,57	31,42
PO_4^{3-}							
SH_2	25,047	0	24,337	0	0	24,253	24,55
SiH_4	33,394	-0,009	33,379	-0,009	0,008	33,386	33,39
SiO_2	25,525	0	25,525	0	0	43,81	31,62
SO_2	19,375	0	36,529	0	0	23,982	26,63
SO_4^{2-}	61,693	0	61,693	0	0	61,693	61,69

Tabela 124: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BLYP/cc-pVTZ

BLYP/cc-pVTZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF_4^-	19,503	0	19,503	0	0	19,503	19,5
BH_4^-	30,698	0	30,698	0	0	30,698	30,7
HCO_3^-	30,333	-2,999	31,589	0	0	16,359	26,09
NO_2^-	10,037	0	27,524	0	0	13,264	16,94
NO_3^-	27,796	0	27,794	0	0	11,674	22,42
OH^-	7,315	0	7,315	0	0	12,3	8,98
AlF_2H	21,399	0	25,332	0	0	23,826	23,52
AlF_3	20,736	0	20,737	0	0	17,92	19,8
AlFH_2	23,797	0	26,663	0	0	30,165	26,88
AlH_3	33,328	0	33,329	0	0	25,783	30,81
BF_3	16,128	0	16,129	0	0	11,495	14,58
BH_3	19,025	0	19,025	0	0	12,463	16,84
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	34,717	1,565	38,402	0	0	23,962	32,36
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	50,203	-2,144	48,907	0	0	34,42	44,51
C_4H_6	47,287	10,935	84,627	0	0	27,13	53,01
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	66,427	-1,162	60,121	0	0	44,768	57,11
$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$	76,813	7,12	77,899	0	0	54,844	69,85
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$	111,264	0,006	90,984	-3,127	-0,013	49,771	84,01
C_6H_6	79,819	0,001	79,819	0	0	34,045	64,56
CF_4	16,633	0	16,633	0	0	16,633	16,63
CH_2F_2	14,914	0	16,936	0	0	15,803	15,88
CH_3F	15,284	0	15,284	0	0	16,256	15,61
CH_4	15,719	0	15,719	0	0	15,719	15,72
CHF_3	16,857	0	16,856	0	0	15,268	16,33
CO	10,336	0	10,336	0	0	14,28	11,65
CO_2	10,259	0	10,259	0	0	24,408	14,98
F_2	2,941	0	2,941	0	0	10,804	5,56
H_2	2,617	0	2,617	0	0	7,037	4,09
H_2CO_3	14,928	0	28,964	0	0	25,838	23,24
H_2PO_4^-	37,878	-0,017	41,262	0,001	0,122	34,729	37,96
H_2SO_4	33,288	0,646	36,015	-0,256	-0,535	31,085	33,46
H_3PO_4	36,852	-0,348	34,688	-1,534	-0,54	34,59	35,38
HCl	10,446	0	10,446	0	0	15,627	12,17
HF	2,87	0	2,87	0	0	5,63	3,79
HSO_4^-	36,852	-1,404	33,468	0,15	-0,013	33,089	34,47
LiH	33,346	0	33,346	0	0	30,857	32,52
NaCl	28,957	0	28,957	0	0	45,074	34,33
NaH	40,585	0	40,585	0	0	63,374	48,18
O_3	7,01	0	27,323	0	0	9,538	14,62
PH_3	27,552	0	27,549	0	0,001	26,392	27,16
SH_2	15,581	0	21,179	0	0	20,553	19,1
SiH_4	30,582	0	30,581	0	0,001	30,581	30,58
SiO_2	22,745	0	22,745	0	0	38,307	27,93
SO_2	15,294	0	31,61	0	0	19,106	22
SO_4^{2-}	33,817	0	33,817	0	0	33,817	33,82

Tabela 125: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BLYP/aug-cc-pVTZ

BLYP/aug-cc-pVTZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	26,72	0	26,72	0	0	26,72	26,72
BH ₄ ⁻	44,085	0	44,085	0	0	44,085	44,09
CO ₃ ²⁻							
HCO ₃ ⁻	42,737	-1,773	46	0	0	27,117	38,62
NO ₂ ⁻	22,32	0	44,74	0	0	33,705	33,59
NO ₃ ⁻	40,5	0	40,509	0	0	22,08	34,36
OH ⁻	31,948	0	31,948	0	0	19,986	27,96
AlF ₂ H	23,369	0	27,801	0	0	26,78	25,98
AlF ₃	23,675	0	23,675	0	0	20,079	22,48
AlFH ₂	26,102	0	29,808	0	0	33,117	29,68
AlH ₃	37,127	0	37,129	0	0	28,905	34,39
BF ₃	18,692	0	18,697	0	0	14,034	17,14
BH ₃	19,934	0	19,952	0	0	15,018	18,3
C ₂ H ₄ O ₂	39,567	1,25	42,948	0	0	27,767	36,76
C ₃ H ₆ O ₂	54,725	-2,295	54,506	0	0	38,332	49,19
C ₄ H ₆	50,95	11,754	89,258	0	0	38,126	59,44
C ₄ H ₈ O ₂	72,442	-1,792	65,464	0	0	48,911	62,27
C ₅ H ₁₀ O ₂	83,313	7,694	83,972	0	0	59,309	75,53
C ₆ H ₅ OCH ₃	117,335	0,005	96,482	-2,358	-0,01	61,406	91,74
C ₆ H ₆	84,552	-0,001	84,554	0,003	-0,013	45,441	71,52
CF ₄	20,47	0	20,47	0	0	20,47	20,47
CH ₂ F ₂	17,404	0	20,463	0	0	18,754	18,87
CH ₃ F	17,221	0	17,221	0	0	19,391	17,94
CH ₄	17,609	0	17,609	0	0	17,609	17,61
CHF ₃	20,488	0	20,491	0	-0,001	18,645	19,87
CO	12,187	0	12,187	0	0	16,091	13,49
CO ₂	12,679	0	12,679	0	0	27,214	17,52
F ₂	5,747	0	5,747	0	0	12,441	7,98
H ₂	4,603	0	4,603	0	0	7,285	5,5
H ₂ CO ₃	19,511	0	32,764	0	0	30,784	27,69
H ₂ PO ₄ ⁻	51,372	-0,016	54,241	0,002	0,251	49,458	51,69
H ₂ SO ₄	39,552	0,481	41,669	-0,183	-0,291	37,608	39,61
H ₃ PO ₄	43,101	-0,296	41,197	-1,471	-0,291	41,476	41,92
HCl	16,078	0	16,078	0	0	18,491	16,88
HF	4,83	0	4,83	0	0	6,994	5,55
HPO ₄ ⁻²							
HSO ₄ ⁻	48,914	-0,643	45,937	0,076	0,062	46,194	47,01
LiH	34,581	0	34,581	0	0	33,062	34,07
NaCl	31,518	0	31,518	0	0	48,233	37,09
NaH	41,541	0	41,541	0	0	69,296	50,79
O ₂							
O ₃	11,295	0	31,73	0	0	14,163	19,06
PH ₃	30,841	0	30,836	0	0,003	32,57	31,42
PO ₄ ⁻³							
SH ₂	25,047	0	24,337	0	0	24,253	24,55
SiH ₄	33,394	-0,009	33,379	-0,009	0,008	33,386	33,39
SiO ₂	25,525	0	25,525	0	0	43,81	31,62
SO ₂	19,375	0	36,529	0	0	23,982	26,63
SO ₄ ⁻²	61,693	0	61,693	0	0	61,693	61,69

Tabela 126: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BLYP/pc-3

BLYP/pc-3							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF_4^-	25,868	0	25,868	0	0	25,868	25,87
BH_4^-	40,361	0	40,361	0	0	40,361	40,36
CO_3^{2-}							
HCO_3^-	41,572	-1,863	43,904	0	0	25,898	37,12
NO_2^-	18,476	0	40,699	0	0	27,008	28,73
NO_3^-	39,024	0	39,031	0	0	20,819	32,96
OH^-	23,466	0	23,466	0	0	17,34	21,42
AlF_2H	22,773	0	27,799	0	0	26,425	25,67
AlF_3	23,634	0	23,634	0	0	19,814	22,36
AlFH_2	24,272	0	29,296	0	0	32,916	28,83
AlH_3	36,637	0	36,638	0	0	24,885	32,72
BF_3	18,647	0	18,65	0	0	14,107	17,13
BH_3	19,79	0	19,79	0	0	13,919	17,83
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	39,277	1,288	42,573	0	0	27,655	36,5
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	54,45	-2,298	54,187	0	0	38,244	48,96
C_4H_6	50,291	11,669	88,801	0	0	37,409	58,83
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	72,127	-1,776	65,173	0	0	48,855	62,05
$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$	82,988	7,676	83,662	0	0	59,269	75,31
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$	0	0	0	0	0	0	0
C_6H_6	83,978	-0,002	83,981	0	0	45,378	71,11
CF_4	20,635	0	20,635	0	0	20,635	20,63
CH_2F_2	17,361	0	20,334	0	0	18,66	18,78
CH_3F	17,16	0	17,159	0	0	18,977	17,77
CH_4	17,354	0	17,354	0	0	17,354	17,35
CHF_3	20,548	0	20,549	0	-0,001	18,643	19,91
CO	12,114	0	12,114	0	0	16,121	13,45
CO_2	12,717	0	12,717	0	0	27,408	17,61
F_2	5,783	0	5,783	0	0	12,673	8,08
H_2	4,331	0	4,331	0	0	7,059	5,24
H_2CO_3	19,4	0	32,503	0	0	30,816	27,57
H_2PO_4^-	49,024	-0,015	51,84	0	0,082	46,879	49,25
H_2SO_4	38,813	0,492	40,884	-0,189	-0,438	37,032	38,91
H_3PO_4	42,272	-0,348	40,383	-1,438	-0,226	40,629	41,09
HCl	14,135	0	14,135	0	0	17,659	15,31
HF	4,958	0	4,958	0	0	6,786	5,57
HPO_4^{2-}							
HSO_4^-	46,97	-0,652	44,156	0,066	0,027	44,17	45,1
LiH	31,026	0	31,026	0	0	32,675	31,58
NaCl	26,4	0	26,4	0	0	47,767	33,52
NaH	38,739	0	38,739	0	0	63,982	47,15
O_2							
O_3	11,036	0	31,445	0	0	13,79	18,76
PH_3	29,892	0	29,888	0	0,003	30,991	30,26
PO_4^{3-}							
SH_2	23,463	0	23,055	0	0	23,037	23,19
SiH_4	32,14	0	32,139	0	0,001	32,139	32,14
SiO_2	24,524	0	24,524	0	0	43,79	30,95
SO_2	18,671	0	35,671	0	0	22,976	25,77
SO_4^{2-}	53,976	0	53,976	0	0	53,976	53,98

Tabela 127: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BLYP/aug-pc-3

BLYP/aug-pc-3							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF_4^-	27,892	0	27,892	0	0	27,892	27,89
BH_4^-	47,406	0	47,406	0	0	47,406	47,41
HCO_3^-	46,577	-1,612	49,75	-0,003	-0,006	30,303	42,21
NO_2^-	31,689	0	56,326	0	0	52,354	46,79
NO_3^-	44,861	0	44,863	0	0	25,319	38,35
OH^-	78,359	0	78,359	0	0	33,876	63,53
AlF_2H	24,38	0	28,728	0	0	27,261	26,79
AlF_3	24,606	0	24,607	0	0	21,38	23,53
AlFH_2	26,673	0	30,024	0	0	33,692	30,13
AlH_3	37,13	0	37,13	0	0	28,743	34,33
BF_3	19,04	0	19,042	0	0	14,784	17,62
BH_3	19,921	0	19,921	0	0	15,074	18,31
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	39,982	1,217	42,985	0	0	28,287	37,08
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	54,82	-2,39	54,697	0	0	38,7	49,41
C_4H_6	51,66	11,689	88,92	0	0	38,482	59,69
C_6H_6	84,729	0	84,731	0	0	45,961	71,81
CF_4	21,369	0	21,369	0	0	21,369	21,37
CH_2F_2	18,184	0	20,908	0	0	19,311	19,47
CH_3F	17,764	0	17,763	0	0	19,596	18,37
CH_4	17,758	0	17,758	0	0	17,758	17,76
CHF_3	21,202	0	21,203	0	-0,001	19,446	20,62
CO	12,63	0	12,63	0	0	16,203	13,82
CO_2	13,624	0	13,624	0	0	27,471	18,24
F_2	7,151	0	7,151	0	0	13,306	9,2
H_2	5,079	0	5,079	0	0	7,05	5,74
H_2CO_3	20,244	0	33,389	0	0	31,234	28,29
H_2PO_4^-	53,164	0,012	55,449	0,001	0,415	50,968	53,19
H_2SO_4	39,88	0,409	41,627	-0,146	-0,217	37,899	39,8
H_3PO_4	43,204	-0,246	41,463	-1,24	-0,377	41,578	42,08
HCl	18,349	0	18,349	0	0	19,817	18,84
HF	6,046	0	6,046	0	0	7,166	6,42
HSO_4^-	50,505	-0,621	47,419	0,076	0,08	47,857	48,59
LiH	33,867	0	33,867	0	0	33,483	33,74
NaCl	33,835	0	33,835	0	0	48,964	38,88
O_3	12,527	0	32,383	0	0	15,227	20,05
PH_3	31,527	0	31,523	0	0,003	33,78	32,28
SH_2	27,403	0	25,961	0	0	26,073	26,48
SiH_4	33,375	-0,002	33,364	0	0,001	33,365	33,37
SiO_2	27,229	0	27,229	0	0	43,808	32,76
SO_2	20,713	0	36,554	0	0	24,76	27,34
SO_4^{2-}	85,92	0	85,92	0	0	85,92	85,92

Tabela 128: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BHHLYP/MCG

BHHLYP/MCG							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF_4^-	18,862	0	18,862	0	0	18,862	18,86
BH_4^-	31,192	0	31,192	0	0	31,192	31,19
CO_3^{2-}	34,101	0	34,105	0	0	21,953	30,05
HCO_3^-	20,038	1,534	29,007	0	0	31,673	26,91
NO_2^-	12,983	0	30,675	0	0	18,267	20,64
NO_3^-	29,986	0	29,989	0	0	14,56	24,84
OH^-	10,597	0	10,597	0	0	12,92	11,37
AlF_2H	0	0	0	0	0	0	0
AlF_3	18,387	0	18,389	0	0	15,753	17,51
AlFH_2	22,55	0	28,586	0	0	25,111	25,42
AlH_3	32,446	0	32,447	0	0	25,059	29,98
BF_3	14,711	0	14,713	0	0	10,809	13,41
BH_3	17,994	0	17,993	0	0	11,447	15,81
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	32,397	1,818	36,757	0	0	24,272	31,14
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	46,18	1,638	46,827	0,001	0	34,026	42,34
C_4H_6	54,988	25,507	168,705	0	0	54,155	92,62
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	61,022	0,295	57,252	0,001	0	43,825	54,03
$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$	76,511	1,961	67,568	0,001	0,001	53,405	65,83
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$	55,799	5,537	101,967	0	0	87,121	81,63
C_6H_6	75,843	0	75,841	0	0	41,848	64,51
CF_4	15,777	0	15,777	0	0	15,777	15,78
CH_2F_2	14,167	0	16,083	0	0	15,165	15,14
CH_3F	14,628	0	14,628	0	0	15,598	14,95
CH_4	15,231	0	15,231	0	0	15,231	15,23
CHF_3	15,968	0	15,968	0	0	14,673	15,54
CO	10,086	0	10,086	0	0	14,475	11,55
CO_2	10,025	0	10,025	0	0	24,646	14,9
F_2	4,654	0	4,654	0	0	11,627	6,98
H_2	2,066	0	2,066	0	0	6,676	3,6
H_2CO_3	26,371	0	26,174	0	0	16,066	22,87
H_2PO_4^-	41,657	-1,136	38,105	0	0	38,245	39,34
H_2SO_4	32,814	-2,012	31,839	0,004	-0,002	30,871	31,84
H_3PO_4	33,665	0,003	33,667	0	0,001	33,714	33,68
HCl	13,43	0	13,43	0	0	16,093	14,32
HF	3,098	0	3,098	0	0	5,356	3,85
HPO_4^{2-}	53,029	-1,496	54,152	0	0	53,74	53,64
HSO_4^-	35,12	0,548	33,851	-1,043	0,211	33,441	34,14
LiH	4,248	0	4,248	0	0	30,536	13,01
NaCl	18,987	0	18,987	0	0	30,295	22,76
NaH	9,172	0	9,172	0	0	47,176	21,84
O_2	6,034	0	5,68	0	0	13,036	8,25
O_3	9,006	0	29,578	0	0	10,853	16,48
PH_3	28,203	0	28,201	0	0,001	28,361	28,26
PO_4^{3-}	47,865	0	47,865	0	0	47,865	47,86
SH_2	19,573	0	21,543	0	0	20,886	20,67
SiH_4	29,856	0	29,856	0	0	29,856	29,86
SiO_2	21,418	0	21,418	0	0	36,033	26,29
SO_2	16,586	0	31,825	0	0	19,361	22,59
SO_4^{2-}	37,168	0	37,168	0	0	37,168	37,17

Tabela 129: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BHHLYP/aMCG-2d1f

BHHLYP/aMCG-2d1f							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	20,424	0	20,424	0	0	20,424	20,42
BH ₄ ⁻	32,313	0	32,313	0	0	32,313	32,31
CO ₃ ⁻²	59,558	0	59,549	0	0	40,436	53,18
HCO ₃ ⁻	22,311	1,193	32,15	0	0	35,476	29,98
NO ₂ ⁻	17,959	0	36,03	0	0	26,264	26,75
NO ₃ ⁻	33,224	0	33,226	0	0	17,868	28,11
OH ⁻	22,019	0	22,019	0	0	12,672	18,9
AlF ₂ H	17,154	0	21,433	0	0	22,183	20,26
AlF ₃	17,708	0	17,709	0	0	14,323	16,58
AlFH ₂	17,193	0	28,351	0	0	24,46	23,33
AlH ₃	32,321	0	32,322	0	0	16,437	27,03
BF ₃	14,918	0	14,919	0	0	11,146	13,66
BH ₃	18,042	0	18,041	0	0	9,909	15,33
C ₂ H ₄ O ₂	32,663	2,093	36,494	0	0	24,271	31,14
C ₃ H ₆ O ₂	46,18	1,638	46,828	0,001	0,001	34,026	42,34
C ₄ H ₆	54,988	25,482	168,659	0	0	54,156	92,6
C ₄ H ₈ O ₂	61,023	0,296	57,258	0,001	0,001	43,825	54,04
C ₅ H ₁₀ O ₂	76,513	1,96	67,568	0,001	0,001	53,405	65,83
C ₆ H ₅ OCH ₃	102,428	0,001	87,118	-2,999	-0,004	55,329	81,62
C ₆ H ₆	75,842	-0,001	75,841	0	0	41,858	64,51
CF ₄	17,018	0	17,018	0	0	17,018	17,02
CH ₂ F ₂	14,846	0	16,435	0	0	15,577	15,62
CH ₃ F	14,874	0	14,873	0	0	15,439	15,06
CH ₄	14,733	0	14,733	0	0	14,733	14,73
CHF ₃	16,819	0	16,82	0	0	15,651	16,43
CO	10,238	0	10,238	0	0	14,792	11,76
CO ₂	10,025	0	10,025	0	0	24,646	14,9
F ₂	4,654	0	4,654	0	0	11,627	6,98
H ₂	2,066	0	2,066	0	0	6,675	3,6
H ₂ CO ₃	26,597	0	26,814	0	0	16,543	23,32
H ₂ PO ₄ ⁻	38,017	0,01	41,759	0,002	0,638	37,659	39,14
H ₂ SO ₄	31,214	0,404	33,803	-0,204	-0,699	30,421	31,81
H ₃ PO ₄	32,2	0	32,198	0	0,001	37,979	34,13
HCl	11,169	0	11,169	0	0	14,373	12,24
HF	3,598	0	3,598	0	0	5,305	4,17
HPO ₄ ⁻²	54,818	0,004	53,655	-0,91	0,006	52,157	53,54
HSO ₄ ⁻	37,082	0,5	36,275	-0,973	0,23	35,843	36,4
LiH	2,7	0	2,7	0	0	33,397	12,93
NaCl	19,188	0	19,188	0	0	32,114	23,5
NaH	22,055	0	22,055	0	0	47,656	30,59
O ₂	6,739	0	6,276	0	0	13,513	8,84
O ₃	9,878	0	30,191	0	0	11,69	17,25
PH ₃	25,233	0	25,231	0	0,002	24,263	24,91
PO ₄ ⁻³	108,234	0	108,234	0	0	108,234	108,23
SH ₂	18,718	0	18,739	0	0	17,553	18,34
SiH ₄	26,55	0	26,55	0	0	26,55	26,55
SiO ₂	18,722	0	18,722	0	0	36,362	24,6
SO ₂	16,586	0	31,825	0	0	19,361	22,59
SO ₄ ⁻²	46,858	0	46,858	0	0	46,858	46,86

Tabela 130: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BHHLYP/aMCG-3d2f1g

BHHLYP/aMCG-3d2f1g							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	21,789	0	21,789	0	0	21,789	21,79
BH ₄ ⁻	35,417	0	35,417	0	0	35,417	35,42
CO ₃ ⁻²	62,238	0	62,226	0	0	43,255	55,91
HCO ₃ ⁻	24,361	1,166	34,22	0	0	36,337	31,64
NO ₂ ⁻	19,729	0	36,944	0	0	27,925	28,2
NO ₃ ⁻	34,654	0	34,654	0	0	19,872	29,73
OH ⁻	25,543	0	25,543	0	0	15,747	22,28
AlF ₂ H	20,156	0	22,425	0	0	23,526	22,04
AlF ₃	19,126	0	19,126	0	0	16,749	18,33
AlFH ₂	22,129	0	29,153	0	0	25,696	25,66
AlH ₃	33,154	0	33,156	0	0	23,428	29,91
BF ₃	15,817	0	15,819	0	0	12,524	14,72
BH ₃	18,285	0	18,284	0	0	13,325	16,63
C ₂ H ₄ O ₂	34,196	1,714	37,004	0	0	25,378	32,19
C ₃ H ₆ O ₂	47,891	1,575	47,294	0,001	0	35,031	43,41
C ₄ H ₆	58,172	25,447	168,762	0	0	55,241	94,06
C ₄ H ₈ O ₂	62,93	0,334	57,74	0,001	0,001	44,748	55,14
C ₅ H ₁₀ O ₂	78,64	2,015	68,094	0,001	0,001	54,309	67,01
C ₆ H ₅ OCH ₃	104,723	0,001	88,658	-2,645	-0,003	57,006	83,46
C ₆ H ₆	78,011	-0,004	78,005	-0,003	-0,005	43,545	66,52
CF ₄	17,852	0	17,852	0	0	17,852	17,85
CH ₂ F ₂	15,792	0	17,519	0	0	16,559	16,62
CH ₃ F	15,73	0	15,729	0	0	16,91	16,12
CH ₄	16,071	0	16,071	0	0	16,071	16,07
CHF ₃	17,693	0	17,695	0	-0,001	16,594	17,33
CO	11,31	0	11,31	0	0	14,65	12,42
CO ₂	11,887	0	11,887	0	0	24,449	16,07
F ₂	5,704	0	5,704	0	0	12,133	7,85
H ₂	4,243	0	4,243	0	0	6,598	5,03
H ₂ CO ₃	28,082	0	27,405	0	0	17,842	24,44
H ₂ PO ₄ ⁻	40,517	-0,013	43,225	0,001	-0,38	39,497	41,08
H ₂ SO ₄	32,709	0,342	34,688	-0,164	-0,501	31,475	32,96
H ₃ PO ₄	35,766	-0,378	34,902	-1,079	0,36	34,16	34,94
HCl	15,031	0	15,031	0	0	17,162	15,74
HF	4,616	0	4,616	0	0	5,964	5,07
HPO ₄ ⁻²	57,742	-0,002	55,885	0,552	-0,001	54,796	56,14
HSO ₄ ⁻	38,968	0,396	37,618	-0,747	0,155	37,305	37,96
LiH	11,66	0	11,66	0	0	27,992	17,1
NaCl	23,598	0	23,598	0	0	32,851	26,68
NaH	24,105	0	24,105	0	0	47,943	32,05
O ₂	7,481	0	7,93	0	0	14,033	9,81
O ₃	11,002	0	30,56	0	0	12,708	18,09
PH ₃	28,727	0	28,725	0	0,001	29,345	28,93
PO ₄ ⁻³	112,53	0	112,53	0	0	112,53	112,53
SH ₂	22,537	0	21,839	0	0	21,555	21,98
SiH ₄	29,811	0	29,811	0	0	29,811	29,81
SiO ₂	22,36	0	22,36	0	0	35,925	26,88
SO ₂	18,445	0	31,443	0	0	21,152	23,68
SO ₄ ⁻²	47,152	0	47,152	0	0	47,152	47,15

Tabela 131: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BHHLYP/6-311G

BHHLYP/6-311G							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF_4^-	11,756	0	11,756	0	0	11,756	11,76
BH_4^-	25,018	0	25,018	0	0	25,018	25,02
CO_3^{2-}	20,848	0	20,848	0	0	10,6	17,43
HCO_3^-	13,229	2,319	20,081	0	0	23,179	18,83
NO_2	6,452	0	23,248	0	0	8,571	12,76
NO_3^-	22,659	0	22,658	0	0	6,825	17,38
OH^-	3,461	0	3,461	0	0	9,641	5,52
AlF_2H	11,894	0	17,048	0	0	19,202	16,05
AlF_3	13,645	0	13,647	0	0	8,387	11,89
AlFH_2	13,325	0	26,547	0	0	21,031	20,3
AlH_3	30,946	0	30,947	0	0	13,131	25,01
BF_3	11,437	0	11,438	0	0	6,251	9,71
BH_3	17,279	0	17,279	0	0	7,205	13,92
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	25,825	2,685	32,176	0	0	18,592	25,53
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	37,373	2,035	41,719	0,001	0,001	28,043	35,71
C_4H_6	48,754	18,596	147,631	0	0	35,246	77,21
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	50,133	0,738	51,412	0	0,001	37,384	46,31
$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$	63,895	2,053	60,692	0,001	0,001	46,463	57,02
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$	93,086	0,001	78,865	-4,484	-0,006	38,108	70,02
C_6H_6	70,07	0,001	70,068	0	0	25,067	55,07
CF_4	11,278	0	11,278	0	0	11,278	11,28
CH_2F_2	10,963	0	12,053	0	0	11,479	11,5
CH_3F	11,809	0	11,809	0	0	11,993	11,87
CH_4	12,491	0	12,491	0	0	12,491	12,49
CHF_3	11,75	0	11,751	0	0	10,648	11,38
CO	8,009	0	8,009	0	0	13,021	9,68
CO_2	6,283	0	6,283	0	0	22,603	11,72
F_2	0,985	0	0,985	0	0	10,094	4,02
H_2	0	0	0	0	0	6,724	2,24
H_2CO_3	22,393	0	21,239	0	0	9,537	17,72
H_2PO_4^-	26,666	-0,029	32,814	0,007	-1,061	24,78	28,09
H_2SO_4	25,546	0,787	30,032	-0,379	-1,115	24,05	26,54
H_3PO_4	28,149	-0,782	26,142	-2,518	0,577	25,78	26,69
HCl	3,756	0	3,756	0	0	12,476	6,66
HF	1,03	0	1,03	0	0	4,247	2,1
HPO_4^{2-}	32,268	-0,005	27,746	1,593	0,001	26,636	28,88
HSO_4^-	28,807	0,857	25,616	-1,571	0,098	25,302	26,57
LiH	23,114	0	23,114	0	0	22,209	22,81
NaCl	13,978	0	13,978	0	0	28,848	18,93
NaH	30,058	0	30,058	0	0	44,041	34,72
O_2	1,936	0	3,244	0	0	11,494	5,56
O_3	4,336	0	26,143	0	0	6,223	12,23
PH_3	23,079	0	23,077	0	0,002	19,827	21,99
PO_4^{3-}	27,807	0	27,807	0	0	27,807	27,81
SH_2	8,144	0	17,325	0	0	15,787	13,75
SiH_4	24,576	0	24,576	0	0	24,576	24,58
SiO_2	14,321	0	14,321	0	0	36,019	21,55
SO_2	11,339	0	30,634	0	0	13,325	18,43
SO_4^{2-}	25,253	0	25,253	0	0	25,253	25,25

Tabela 132: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BHHLYP/6-311G+

BHHLYP/6-311G+							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	16,67	0	16,67	0	0	16,67	16,67
BH ₄ ⁻	27,937	0	27,937	0	0	27,937	27,94
CO ₃ ⁻²	41,564	0	41,568	0	0	24,831	35,99
HCO ₃ ⁻	18,535	1,459	28,415	0	0	33,329	26,76
NO ₂ ⁻	14,134	0	32,497	0	0	19,47	22,03
NO ₃ ⁻	30,661	0	30,666	0	0	13,628	24,99
OH ⁻	9,669	0	9,669	0	0	11,066	10,13
AlF ₂ H	14,204	0	20,195	0	0	20,919	18,44
AlF ₃	16,013	0	16,015	0	0	10,68	14,24
AlFH ₂	14,298	0	27,722	0	0	23,303	21,77
AlH ₃	32,187	0	32,188	0	0	13,212	25,86
BF ₃	13,282	0	13,283	0	0	8,069	11,54
BH ₃	17,472	0	17,472	0	0	7,202	14,05
C ₂ H ₄ O ₂	29,255	2,811	35,713	0	0	21,303	28,76
C ₃ H ₆ O ₂	41,483	1,855	45,444	0,001	0,001	30,835	39,25
C ₄ H ₆	51,646	25,273	167,589	0	0	51,23	90,16
C ₄ H ₈ O ₂	54,825	0,398	55,381	0	0,001	40,375	50,19
C ₅ H ₁₀ O ₂	68,851	1,882	65,12	0,001	0,001	49,707	61,23
C ₆ H ₅ OCH ₃	97,827	0,001	83,268	-3,644	-0,004	50,211	77,1
C ₆ H ₆	73,148	0	73,147	0	0	37,71	61,34
CF ₄	14,239	0	14,239	0	0	14,239	14,24
CH ₂ F ₂	12,369	0	14,167	0	0	13,211	13,25
CH ₃ F	12,747	0	12,746	0	0	13,375	12,96
CH ₄	12,926	0	12,926	0	0	12,926	12,93
CHF ₃	14,301	0	14,302	0	-0,001	12,917	13,84
CO	8,998	0	8,998	0	0	14,977	10,99
CO ₂	7,176	0	7,176	0	0	25,788	13,38
F ₂	2,39	0	2,39	0	0	11,182	5,32
H ₂	0	0	0	0	0	6,724	2,24
H ₂ CO ₃	24,788	0	25,763	0	0	12,923	21,16
H ₂ PO ₄ ⁻	33,466	-0,031	40,216	0,008	-1,15	33,682	35,79
H ₂ SO ₄	29,077	0,726	33,724	-0,349	-1,093	28,68	30,49
H ₃ PO ₄	32,288	-0,727	30,523	-2,483	0,621	30,837	31,22
HCl	5,919	0	5,919	0	0	12,674	8,17
HF	1,832	0	1,832	0	0	4,666	2,78
HPO ₄ ⁻²	45,745	-0,005	45,69	2,182	0,005	43,099	44,84
HSO ₄ ⁻	34,832	0,808	34,149	-1,567	0,424	33,341	34,11
LiH	23,237	0	23,237	0	0	22,381	22,95
NaCl	14,94	0	14,94	0	0	30,464	20,11
NaH	30,327	0	30,327	0	0	44,528	35,06
O ₂	3,978	0	4,379	0	0	13,005	7,12
O ₃	7,378	0	29,541	0	0	9,022	15,31
PH ₃	23,312	0	23,31	0	0,002	21,206	22,61
PO ₄ ⁻³	65,672	0	65,672	0	0	65,672	65,67
SH ₂	13,805	0	17,505	0	0	15,859	15,72
SiH ₄	25,129	0	25,129	0	0	25,129	25,13
SiO ₂	15,527	0	15,527	0	0	41,274	24,11
SO ₂	13,568	0	34,274	0	0	15,871	21,24
SO ₄ ⁻²	40,691	0	40,691	0	0	40,691	40,69

Tabela 133: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BHHLYP/cc-pVDZ

BHHLYP/cc-pVDZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	12,979	0	12,979	0	0	12,979	12,98
BH ₄ ⁻	23,901	0	23,901	0	0	23,901	23,9
CO ₃ ⁻²	19,914	0	19,914	0	0	10,953	16,93
HCO ₃ ⁻	13,4	2,046	19,728	0	0	21,509	18,21
NO ₂ ⁻	6,575	0	21,928	0	0	8,737	12,41
NO ₃ ⁻	21,262	0	21,262	0	0	7,275	16,6
OH ⁻	3,484	0	3,484	0	0	8,934	5,3
AlF ₂ H	15,888	0	17,746	0	0	19,123	17,59
AlF ₃	14,394	0	14,395	0	0	11,845	13,54
AlFH ₂	18,301	0	24,523	0	0	20,914	21,25
AlH ₃	28,152	0	28,153	0	0	19,634	25,31
BF ₃	11,819	0	11,82	0	0	7,751	10,46
BH ₃	16,829	0	16,829	0	0	9,456	14,37
C ₂ H ₄ O ₂	26,79	1,996	31,001	0	0	18,887	25,56
C ₃ H ₆ O ₂	38,924	1,914	40,603	0,001	0,001	28,141	35,89
C ₄ H ₆	48,286	18,012	144,665	0	0	32,698	75,22
C ₄ H ₈ O ₂	52,213	0,748	50,229	0,001	0,001	37,358	46,6
C ₅ H ₁₀ O ₂	66,489	2,157	59,485	0,001	0,001	46,325	57,43
C ₆ H ₅ OCH ₃	94,823	0,002	80,076	-4,32	-0,005	37,521	70,81
C ₆ H ₆	71,227	0	71,225	0	0	24,184	55,55
CF ₄	11,613	0	11,613	0	0	11,613	11,61
CH ₂ F ₂	11,728	0	12,408	0	0	12,006	12,05
CH ₃ F	12,299	0	12,299	0	0	12,537	12,38
CH ₄	12,814	0	12,814	0	0	12,814	12,81
CHF ₃	12,075	0	12,076	0	0	11,385	11,85
CO	8,095	0	8,095	0	0	11,993	9,39
CO ₂	7,303	0	7,303	0	0	20,233	11,61
F ₂	1,501	0	1,501	0	0	9,509	4,17
H ₂	1,172	0	1,172	0	0	6,359	2,9
H ₂ CO ₃	22,452	0	20,164	0	0	10,273	17,63
H ₂ PO ₄ ⁻	25,997	-0,019	29,86	0,005	-0,678	23,683	26,51
H ₂ SO ₄	23,808	0,575	26,915	-0,295	-0,94	22,111	24,28
H ₃ PO ₄	27,157	-0,54	25,861	-1,598	0,472	24,519	25,85
HCl	6,39	0	6,39	0	0	12,83	8,54
HF	1,595	0	1,595	0	0	4,092	2,43
HPO ₄ ⁻²	29,736	-0,004	25,279	1,039	0	24,919	26,64
HSO ₄ ⁻	25,764	0,741	23,074	-1,341	0,004	22,943	23,93
LiH	26,893	0	26,893	0	0	19,802	24,53
NaCl	19,362	0	19,362	0	0	27,829	22,18
NaH	33,464	0	33,464	0	0	42,966	36,63
O ₂	2,533	0	3,468	0	0	11,019	5,67
O ₃	4,682	0	24,932	0	0	6,643	12,09
PH ₃	23,685	0	23,684	0	0	20,013	22,46
PO ₄ ⁻³	25,05	0	25,05	0	0	25,05	25,05
SH ₂	9,599	0	17,935	0	0	16,316	14,62
SiH ₄	25,708	0	25,708	0	0	25,708	25,71
SiO ₂	16,705	0	16,705	0	0	30,129	21,18
SO ₂	11,642	0	25,73	0	0	13,762	17,04
SO ₄ ⁻²	22,555	0	22,555	0	0	22,555	22,55

Tabela 134: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BHHLYP/aug-cc-pVDZ

BHHLYP/aug-cc-pVDZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	21,492	0	21,492	0	0	21,492	21,49
BH ₄ ⁻	36,762	0	36,762	0	0	36,762	36,76
CO ₃ ⁻²	48,197	0	48,193	0	0	33,98	43,46
HCO ₃ ⁻	23,696	1,344	33,384	0	0	35,383	30,82
NO ₂ ⁻	18,322	0	35,042	0	0	25,348	26,24
NO ₃ ⁻	33,296	0	33,299	0	0	18,916	28,5
OH ⁻	19,47	0	19,47	0	0	16,299	18,41
AlF ₂ H	20,278	0	22,189	0	0	23,209	21,89
AlF ₃	18,708	0	18,71	0	0	16,358	17,93
AlFH ₂	23,592	0	29,117	0	0	25,695	26,13
AlH ₃	33,492	0	33,494	0	0	26,87	31,29
BF ₃	15,612	0	15,615	0	0	12,148	14,46
BH ₃	18,403	0	18,403	0	0	14,073	16,96
C ₂ H ₄ O ₂	34,173	1,812	37,036	0	0,001	25,166	32,13
C ₃ H ₆ O ₂	47,88	1,563	47,367	0,001	0,001	34,906	43,38
C ₄ H ₆	59,219	25,963	169,361	0	0	54,611	94,4
C ₄ H ₈ O ₂	62,959	0,296	57,819	0,001	0,001	44,625	55,13
C ₅ H ₁₀ O ₂	78,676	1,996	68,195	0,002	0,001	54,187	67,02
C ₆ H ₅ OCH ₃	105,002	0,001	88,752	-2,603	-0,003	57,125	83,63
C ₆ H ₆	78,31	-0,001	78,31	0	0	43,708	66,78
CF ₄	17,368	0	17,368	0	0	17,368	17,37
CH ₂ F ₂	15,481	0	17,366	0	0	16,382	16,41
CH ₃ F	15,587	0	15,586	0	0	17,005	16,06
CH ₄	16,207	0	16,207	0	0	16,207	16,21
CHF ₃	17,338	0	17,34	0	-0,001	16,216	16,96
CO	11,234	0	11,234	0	0	14,575	12,35
CO ₂	11,51	0	11,51	0	0	24,332	15,78
F ₂	5,096	0	5,096	0	0	11,68	7,29
H ₂	4,412	0	4,412	0	0	6,693	5,17
H ₂ CO ₃	27,896	0	27,205	0	0	17,483	24,19
H ₂ PO ₄ ⁻	40,239	-0,014	43,28	0,004	-0,49	39,309	40,94
H ₂ SO ₄	32,61	0,378	34,802	-0,183	-0,545	31,356	32,92
H ₃ PO ₄	35,818	-0,43	34,837	-1,217	0,399	34,183	34,95
HCl	15,041	0	15,041	0	0	17,346	15,81
HF	4,123	0	4,123	0	0	5,958	4,73
HPO ₄ ⁻²	54,717	-0,003	52,221	0,238	0,001	51,705	52,88
HSO ₄ ⁻	38,632	0,417	37,198	-0,789	0,138	36,905	37,58
LiH	27,598	0	27,598	0	0	23,321	26,17
NaCl	25,724	0	25,724	0	0	32,614	28,02
NaH	34,173	0	34,173	0	0	49,318	39,22
O ₂	7,319	0	6,957	0	0	13,574	9,28
O ₃	10,366	0	30,065	0	0	12,151	17,53
PH ₃	29,082	0	29,079	0	0,001	30,181	29,45
PO ₄ ⁻³	78,081	0	78,081	0	0	78,081	78,08
SH ₂	23,124	0	23,065	0	0	22,675	22,95
SiH ₄	30,808	0	30,808	0	0	30,808	30,81
SiO ₂	22,066	0	22,066	0	0	35,929	26,69
SO ₂	17,936	0	31,669	0	0	21,039	23,55
SO ₄ ⁻²	46,047	0	46,047	0	0	46,047	46,05

Tabela 135: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BHHLYP/cc-pVTZ

BHHLYP/cc-pVTZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	16,946	0	16,946	0	0	16,946	16,95
BH ₄ ⁻	28,588	0	28,588	0	0	28,588	28,59
CO ₃ ⁻²	26,272	0	26,272	0	0	16,332	22,96
HCO ₃ ⁻	17,397	1,778	24,684	0	0	26,446	22,84
NO ₂ ⁻	9,713	0	25,469	0	0	12,353	15,84
NO ₃ ⁻	25,108	0	25,108	0	0	11,259	20,49
OH ⁻	6,442	0	6,442	0	0	10,896	7,93
AlF ₂ H	18,609	0	20,264	0	0	21,492	20,12
AlF ₃	16,75	0	16,753	0	0	14,602	16,03
AlFH ₂	21,575	0	26,977	0	0	23,5	24,02
AlH ₃	30,634	0	30,636	0	0	24,168	28,48
BF ₃	13,909	0	13,91	0	0	10,201	12,67
BH ₃	17,806	0	17,805	0	0	11,878	15,83
C ₂ H ₄ O ₂	30,72	1,936	34,105	0	0	22,426	29,08
C ₃ H ₆ O ₂	44,031	1,674	44,398	0,001	0,001	32,149	40,19
C ₄ H ₆	52,458	20,658	154,377	0	0	40,041	82,29
C ₄ H ₈ O ₂	58,619	0,487	54,555	0,001	0,001	41,779	51,65
C ₅ H ₁₀ O ₂	73,976	2,048	64,543	0,001	0,001	51,176	63,23
C ₆ H ₅ OCH ₃	100,452	0,001	84,631	-3,384	-0,005	47,581	77,55
C ₆ H ₆	74,598	0,001	74,596	0	0	33,592	60,93
CF ₄	14,623	0	14,623	0	0	14,623	14,62
CH ₂ F ₂	13,667	0	14,939	0	0	14,315	14,31
CH ₃ F	14,175	0	14,175	0	0	14,763	14,37
CH ₄	14,767	0	14,767	0	0	14,767	14,77
CHF ₃	14,819	0	14,818	0	0	13,786	14,47
CO	9,835	0	9,835	0	0	13,366	11,01
CO ₂	9,525	0	9,525	0	0	22,271	13,77
F ₂	2,864	0	2,864	0	0	10,49	5,41
H ₂	2,591	0	2,591	0	0	6,649	3,94
H ₂ CO ₃	25,111	0	23,788	0	0	14,079	20,99
H ₂ PO ₄ ⁻	31,688	-0,016	34,965	0,004	-0,575	30,005	32,22
H ₂ SO ₄	28,155	0,48	30,832	-0,245	-0,815	26,853	28,61
H ₃ PO ₄	31,491	-0,468	30,391	-1,392	0,423	29,43	30,44
HCl	10,215	0	10,215	0	0	14,881	11,77
HF	2,673	0	2,673	0	0	5,063	3,47
HPO ₄ ⁻²	36,54	-0,003	32,836	0,843	0	32,503	33,96
HSO ₄ ⁻	30,859	0,613	28,762	-1,118	0,007	28,649	29,42
LiH	26,556	0	26,556	0	0	22,372	25,16
NaCl	23,477	0	23,477	0	0	30,582	25,85
NaH	33,69	0	33,69	0	0	46,107	37,83
O ₂	4,787	0	4,259	0	0	12,139	7,06
O ₃	6,743	0	27,228	0	0	8,777	14,25
PH ₃	26,418	0	26,417	0	0	24,689	25,84
PO ₄ ⁻³	34,224	0	34,224	0	0	34,224	34,22
SH ₂	15,206	0	20,368	0	0	19,446	18,34
SiH ₄	28,593	0	28,593	0	0	28,593	28,59
SiO ₂	20,06	0	20,06	0	0	32,183	24,1
SO ₂	14,775	0	28,258	0	0	17,48	20,17
SO ₄ ⁻²	29,448	0	29,448	0	0	29,448	29,45

Tabela 136: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BHHLYP/aug-cc-pVTZ

BHHLYP/aug-cc-pVTZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	22,005	0	22,005	0	0	22,005	22,01
BH ₄ ⁻	37,901	0	37,901	0	0	37,901	37,9
CO ₃ ⁻²	54,012	0	53,999	0	0	37,185	48,4
HCO ₃ ⁻	24,579	1,279	34,437	0	0	36,275	31,76
NO ₂ ⁻	19,651	0	36,266	0	0	27,126	27,68
NO ₃ ⁻	34,403	0	34,402	0	0	19,908	29,57
OH ⁻	22,477	0	22,477	0	0	18,467	21,14
AlF ₂ H	20,971	0	22,645	0	0	23,896	22,5
AlF ₃	19,465	0	19,467	0	0	17,247	18,73
AlFH ₂	23,994	0	29,449	0	0	25,934	26,46
AlH ₃	33,417	0	33,418	0	0	26,794	31,21
BF ₃	15,904	0	15,906	0	0	12,578	14,8
BH ₃	18,347	0	18,347	0	0	14,071	16,92
C ₂ H ₄ O ₂	34,376	1,691	37,126	0	0	25,457	32,32
C ₃ H ₆ O ₂	48,082	1,594	47,409	0,001	0,001	35,121	43,54
C ₄ H ₆	60,15	25,644	169,109	0	0	55,156	94,8
C ₄ H ₈ O ₂	63,122	0,345	57,858	0,001	0,001	44,832	55,27
C ₅ H ₁₀ O ₂	78,843	2,036	68,215	0,001	0,001	54,396	67,15
C ₆ H ₅ OCH ₃	105,115	0,001	88,925	-2,61	-0,003	57,231	83,76
C ₆ H ₆	78,572	0	78,573	0,006	0,001	43,843	67
CF ₄	17,886	0	17,886	0	0	17,886	17,89
CH ₂ F ₂	15,917	0	17,631	0	0	16,71	16,75
CH ₃ F	15,87	0	15,87	0	0	17,136	16,29
CH ₄	16,275	0	16,275	0	0	16,275	16,28
CHF ₃	17,754	0	17,755	0	-0,001	16,68	17,4
CO	11,529	0	11,529	0	0	14,67	12,58
CO ₂	12,085	0	12,085	0	0	24,397	16,19
F ₂	5,711	0	5,711	0	0	12,087	7,84
H ₂	4,733	0	4,733	0	0	6,555	5,34
H ₂ CO ₃	28,292	0	27,436	0	0	17,906	24,54
H ₂ PO ₄ ⁻	40,9	-0,012	43,527	0,003	-0,373	39,812	41,41
H ₂ SO ₄	32,862	0,342	34,821	-0,166	-0,49	31,58	33,09
H ₃ PO ₄	35,958	-0,374	35,07	-1,068	0,355	34,295	35,11
HCl	16,276	0	16,276	0	0	18,081	16,88
HF	4,658	0	4,658	0	0	6,061	5,13
HPO ₄ ⁻²	56,757	-0,002	54,463	0,427	0,002	53,683	54,97
HSO ₄ ⁻	39,175	0,404	37,721	-0,764	0,145	37,423	38,11
LiH	27,174	0	27,174	0	0	24,278	26,21
NaCl	27,445	0	27,445	0	0	33,695	29,53
NaH	34,255	0	34,255	0	0	48,509	39,01
O ₂	7,509	0	7,901	0	0	14,013	9,81
O ₃	10,973	0	30,507	0	0	12,7	18,06
PH ₃	29,525	0	29,522	0	0,001	30,952	30
PO ₄ ⁻³	90,643	0	90,643	0	0	90,643	90,64
SH ₂	24,381	0	23,967	0	0	23,729	24,03
SiH ₄	30,699	0	30,699	0	0	30,699	30,7
SiO ₂	23,33	0	23,33	0	0	35,902	27,52
SO ₂	18,681	0	31,604	0	0	21,503	23,93
SO ₄ ⁻²	48,046	0	48,046	0	0	48,046	48,05

Tabela 137: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BHHLYP/pc-3

BHHLYP/pc-3							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF_4^-	21,357	0	21,357	0	0	21,357	21,36
BH_4^-	34,684	0	34,684	0	0	34,684	34,68
CO_3^{2-}	43,962	0	43,962	0	0	30,972	39,63
HCO_3^-	23,268	1,29	32,682	0	0	34,785	30,25
NO_2^-	16,498	0	33,887	0	0	22,199	24,19
NO_3^-	32,83	0	32,833	0	0	18,415	28,03
OH^-	16,853	0	16,853	0	0	14,761	16,16
AlF_2H	19,996	0	22,155	0	0	23,468	21,87
AlF_3	19,026	0	19,027	0	0	16,479	18,18
AlFH_2	22,136	0	29,063	0	0	25,435	25,54
AlH_3	33,047	0	33,049	0	0	23,582	29,89
BF_3	15,713	0	15,715	0	0	12,308	14,58
BH_3	18,243	0	18,243	0	0	13,222	16,57
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	34,007	1,776	36,865	0	0	25,122	32
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	47,733	1,55	47,212	0,001	0,001	34,864	43,27
C_4H_6	57,891	25,33	168,245	0	0	52,806	92,98
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	62,804	0,296	57,653	0,001	0,001	44,603	55,02
$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$	78,517	1,985	68,022	0,001	0,001	54,178	66,91
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$	104,674	0,001	88,583	-2,653	-0,004	56,875	83,38
C_6H_6	77,996	-0,001	77,996	0	0	43,389	66,46
CF_4	17,586	0	17,586	0	0	17,586	17,59
CH_2F_2	15,547	0	17,37	0	0	16,407	16,44
CH_3F	15,584	0	15,583	0	0	16,786	15,98
CH_4	15,995	0	15,995	0	0	15,995	15,99
CHF_3	17,481	0	17,482	0	-0,001	16,319	17,09
CO	11,213	0	11,213	0	0	14,611	12,35
CO_2	11,592	0	11,592	0	0	24,395	15,86
F_2	5,209	0	5,209	0	0	11,921	7,45
H_2	4,167	0	4,167	0	0	6,568	4,97
H_2CO_3	27,781	0	27,286	0	0	17,481	24,18
H_2PO_4^-	39,159	-0,014	42,097	0,004	-0,578	38,139	39,8
H_2SO_4	32,174	0,384	34,331	-0,191	-0,636	31,054	32,52
H_3PO_4	35,366	-0,409	34,341	-1,23	0,376	33,785	34,5
HCl	13,39	0	13,39	0	0	16,676	14,49
HF	4,315	0	4,315	0	0	5,904	4,84
HPO_4^{2-}	50,661	-0,001	47,878	0,231	0	47,477	48,67
HSO_4^-	37,709	0,416	36,298	-0,766	0,072	36,113	36,71
LiH	24,718	0	24,718	0	0	24,047	24,49
NaCl	21,982	0	21,982	0	0	32,721	25,56
NaH	31,102	0	31,102	0	0	47,086	36,43
O_2	6,875	0	7,258	0	0	13,714	9,28
O_3	10,241	0	30,203	0	0	12,061	17,5
PH_3	28,283	0	28,281	0	0,001	28,647	28,4
PO_4^{3-}	61,301	0	61,301	0	0	61,301	61,3
SH_2	21,916	0	21,961	0	0	21,587	21,82
SiH_4	29,641	0	29,641	0	0	29,641	29,64
SiO_2	21,608	0	21,608	0	0	35,855	26,36
SO_2	17,6	0	30,89	0	0	20,462	22,98
SO_4^{2-}	43,034	0	43,034	0	0	43,034	43,03

Tabela 138: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores BHHLYP/aug-pc-3

BHHLYP/aug-pc-3							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	22,288	0	22,288	0	0	22,288	22,29
BH ₄ ⁻	38,207	0	38,207	0	0	38,207	38,21
CO ₃ ⁻²	73,746	0	73,727	0	0	50,293	65,92
HCO ₃ ⁻	25,272	1,201	35,145	0	0	36,845	32,42
NO ₂ ⁻	21,829	0	37,935	0	0	29,956	29,91
NO ₃ ⁻	35,366	0	35,367	0	0	20,779	30,5
OH ⁻	32,13	0	32,13	0	0	21,731	28,66
AlF ₂ H	21,137	0	22,753	0	0	24,043	22,64
AlF ₃	19,634	0	19,635	0	0	17,497	18,92
AlFH ₂	24,049	0	29,55	0	0	25,988	26,53
AlH ₃	33,413	0	33,415	0	0	26,721	31,18
BF ₃	15,95	0	15,952	0	0	12,74	14,88
BH ₃	18,332	0	18,332	0	0	14,059	16,91
C ₂ H ₄ O ₂	34,414	1,656	37,128	0	0	25,565	32,37
C ₃ H ₆ O ₂	48,086	1,59	47,388	0,001	0,001	35,177	43,55
C ₄ H ₆	60,841	25,528	168,805	0	0	55,653	95,1
C ₄ H ₈ O ₂	0	0	0	0	0	0	0
C ₅ H ₁₀ O ₂	0	0	0	0	0	0	0
C ₆ H ₅ OCH ₃	0	0	0	0	0	0	0
C ₆ H ₆	0	0	0	0	0	0	0
CF ₄	18,03	0	18,03	0	0	18,03	18,03
CH ₂ F ₂	16,051	0	17,699	0	0	16,794	16,85
CH ₃ F	15,957	0	15,956	0	0	17,145	16,35
CH ₄	16,278	0	16,278	0	0	16,278	16,28
CHF ₃	17,87	0	17,871	0	-0,001	16,817	17,52
CO	11,578	0	11,578	0	0	14,654	12,6
CO ₂	12,26	0	12,26	0	0	24,415	16,31
F ₂	6,003	0	6,003	0	0	12,323	8,11
H ₂	4,706	0	4,706	0	0	6,559	5,32
H ₂ CO ₃	28,391	0	27,517	0	0	18,06	24,66
H ₂ PO ₄ ⁻	41,275	-0,012	43,715	0,003	-0,298	40,031	41,67
H ₂ SO ₄	32,889	0,335	34,804	-0,161	-0,486	31,591	33,09
H ₃ PO ₄	35,968	-0,363	35,127	-1,027	0,347	34,303	35,13
HCl	16,752	0	16,752	0	0	18,364	17,29
HF	4,982	0	4,982	0	0	6,112	5,36
HPO ₄ ⁻²	60,061	-0,001	57,987	0,483	0,002	56,967	58,34
HSO ₄ ⁻	39,498	0,39	38,052	-0,732	0,154	37,74	38,43
LiH	27,164	0	27,164	0	0	24,264	26,2
NaCl	28,083	0	28,083	0	0	34,196	30,12
NaH	33,952	0	33,952	0	0	47,634	38,51
O ₂	7,744	0	8,182	0	0	14,269	10,07
O ₃	11,245	0	30,689	0	0	12,95	18,29
PH ₃	29,541	0	29,539	0	0,001	31,069	30,05
PO ₄ ⁻³	1139,614	0	55,862	-0,001	0	1139,665	778,38
SH ₂	24,782	0	24,243	0	0	24,042	24,36
SiH ₄	30,592	0	30,592	0	0	30,592	30,59
SiO ₂	23,577	0	23,577	0	0	35,811	27,65
SO ₂	18,993	0	31,421	0	0	21,652	24,02
SO ₄ ⁻²	51,24	0	51,24	0	0	51,24	51,24

Tabela 139: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores PBE0/MCG

PBE0/MCG							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	20,273	0	20,273	0	0	20,273	20,27
BH ₄ ⁻	33,142	0	33,142	0	0	33,142	33,14
CO ₃ ⁻²	23,049	0	37,034	0	0	37,038	32,37
HCO ₃ ⁻	33,359	-2,407	32,559	0	0	19,525	28,48
NO ₂ ⁻	13,371	0	32,043	0	0	19,527	21,65
NO ₃ ⁻	31,499	0,001	31,502	0	0	14,978	25,99
OH ⁻	11,579	0	11,579	0	0	13,803	12,32
AlF ₂ H	23,621	0	24,788	0	0	21,2	23,2
AlF ₃	20,149	0	20,147	0	0	17,255	19,18
AlFH ₂	26,913	0	30,512	0	0	24,055	27,16
AlH ₃	34,444	-0,002	34,441	0	0	26,465	31,78
BF ₃	15,799	0,001	15,799	0	0	11,436	14,34
BH ₃	18,824	0	18,822	0	0	11,944	16,53
C ₂ H ₄ O ₂	34,109	1,592	38,24	0	0	24,738	32,36
C ₃ H ₆ O ₂	49,477	-1,618	47,935	0	0	34,89	44,1
C ₄ H ₆	45,503	10,237	83,735	0	0	32,477	53,91
C ₄ H ₈ O ₂	64,315	-1,249	59,665	0	0	45,013	56,33
C ₅ H ₁₀ O ₂	81,05	2,265	70,067	0,001	0,001	54,896	68,67
C ₆ H ₅ OCH ₃	106,657	0,002	89,522	-2,945	-0,006	55,17	83,78
C ₆ H ₆	40,446	0	78,225	0	0	78,224	65,63
CF ₄	16,714	0	16,714	0	0	16,714	16,71
CH ₂ F ₂	14,877	0	16,993	0	0	15,953	15,94
CH ₃ F	15,263	0	15,262	0	0	16,287	15,6
CH ₄	15,75	0	15,75	0	0	15,75	15,75
CHF ₃	16,926	0	16,927	0	-0,001	15,504	16,45
CO	10,351	0	10,351	0	0	15,006	11,9
CO ₂	10,119	0	10,119	0	0	25,277	15,17
F ₂	3,515	0	3,515	0	0	10,785	5,94
H ₂	2,909	0	2,909	0	0	6,809	4,21
H ₂ CO ₃	28,172	0	27,541	0	0	16,656	24,12
H ₂ PO ₄ ⁻	40,124	0	43,322	0	0,272	38,533	40,66
H ₂ SO ₄	32,927	0,517	35,609	-0,207	-0,595	31,736	33,42
H ₃ PO ₄	37,036	0,127	35,598	-1,358	-0,355	35,417	36,02
HCl	13,716	0	13,716	0	0	16,368	14,6
HF	3,242	0	3,242	0	0	5,596	4,03
HPO ₄ ⁻²	49,882	0,009	45,787	0,334	0,025	44,753	46,81
HSO ₄ ⁻	37,699	0,701	36,109	-1	0,302	35,758	36,52
LiH	4,352	0	4,352	0	0	35,675	14,79
NaCl	19,713	0	19,713	0	0	33,086	24,17
NaH	9,666	0	9,666	0	0	52,315	23,88
O ₂	6,319	0	5,739	0	0	13,005	8,35
O ₃	28,824	0	11,346	0	0	9,154	16,44
PH ₃	28,881	0	28,879	0	0,001	29,319	29,03
PO ₄ ⁻³	53,291	-0,004	51,572	-0,006	-0,001	51,15	52
SH ₂	20,004	0	21,9	0	0	21,422	21,11
SiH ₄	31,399	-0,001	31,398	0	0	31,399	31,4
SiO ₂	23,626	0	23,626	0	0	38,208	28,49
SO ₂	16,985	0	31,971	0	0	20,602	23,19
SO ₄ ⁻²	39,927	0	39,927	0	0	39,927	39,93

Tabela 140: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores PBE0/aMCG-2d1f

PBE0/aMCG-2d1f							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	22,33	0	22,33	0	0	22,33	22,33
BH ₄ ⁻	35,083	0	35,083	0	0	35,083	35,08
CO ₃ ⁻²	104,237	0	93,653	0	0	129,352	109,08
HCO ₃ ⁻	38,248	-2,038	36,597	-0,001	0,001	23,099	32,65
NO ₂	19,837	0	40,181	0	0	32,181	30,73
NO ₃ ⁻	35,953	0,005	35,955	0	0,001	18,974	30,29
OH ⁻	32,161	0	32,161	0	0	13,499	25,94
AlF ₂ H	18,517	0	23,403	0	0	24,015	21,98
AlF ₃	19,553	0	19,553	0	0	15,707	18,27
AlFH ₂	18,484	0	30,256	0	0	26,494	25,08
AlH ₃	34,383	0	34,38	0	0	17,567	28,78
BF ₃	16,097	0,001	16,096	0	0	11,862	14,68
BH ₃	18,852	0	18,849	0	0	10,361	16,02
C ₂ H ₄ O ₂	34,5	1,74	38,745	0	0	25,182	32,81
C ₃ H ₆ O ₂	49,997	-1,542	48,184	0	0	35,272	44,48
C ₄ H ₆	44,668	10,196	84,198	0	0	33,689	54,19
C ₄ H ₈ O ₂	64,491	-1,141	60,256	0	0	45,434	56,73
C ₅ H ₁₀ O ₂	81,111	2,235	70,759	0,001	0	55,363	69,08
C ₆ H ₅ OCH ₃	106,481	0,002	89,72	-3,073	-0,005	56,343	84,18
C ₆ H ₆	41,826	0	77,881	0	0	77,878	65,86
CF ₄	18,155	0	18,155	0	0	18,155	18,15
CH ₂ F ₂	15,645	0	17,474	0	0	16,465	16,53
CH ₃ F	15,546	0	15,546	0	0	16,19	15,76
CH ₄	15,235	0	15,235	0	0	15,235	15,23
CHF ₃	17,951	0	17,952	0	0	16,636	17,51
CO	10,552	0	10,552	0	0	15,393	12,17
CO ₂	10,384	0	10,384	0	0	25,799	15,52
F ₂	4,91	0	4,91	0	0	11,449	7,09
H ₂	2,137	0	2,137	0	0	6,882	3,72
H ₂ CO ₃	28,529	0	28,395	0	0	17,288	24,74
H ₂ PO ₄ ⁻	41,845	-0,003	45,796	-0,001	0,45	41,279	42,97
H ₂ SO ₄	33,446	0,501	36,206	-0,207	-0,591	32,504	34,05
H ₃ PO ₄	34,693	0	34,694	0	0,001	40,91	36,77
HCl	11,347	0	11,347	0	0	14,577	12,42
HF	3,822	0	3,822	0	0	5,555	4,4
HPO ₄ ⁻²	43,763	-26,17	51,324	-9,841	-7,685	68,894	54,66
HSO ₄ ⁻	40,444	0,624	39,466	-0,912	0,345	39,089	39,67
LiH	2,765	0	2,765	0	0	39,572	15,03
NaCl	20,158	0	20,158	0	0	35,298	25,2
NaH	24,766	0	24,766	0	0	53,428	34,32
O ₂	6,377	0	7,199	0	0	13,631	9,07
O ₃	29,651	0	12,39	0	0	10,138	17,39
PH ₃	25,649	0	25,648	0	0,002	25,125	25,47
PO ₄ ⁻³	0	0	0	0	0	0	0
SH ₂	19,083	0	18,905	0	0	18,1	18,7
SiH ₄	27,988	-0,001	27,987	0	0,002	27,988	27,99
SiO ₂	19,917	0	19,917	0	0	39,601	26,48
SO ₂	16,898	0	33,43	0	0	20,351	23,56
SO ₄ ⁻²	54,48	0	54,48	0	0	54,48	54,48

Tabela 141: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores PBE0/aMCG-3d2f1g

PBE0/aMCG-3d2f1g							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	23,774	0	23,774	0	0	23,774	23,77
BH ₄ ⁻	38,49	0	38,49	0	0	38,49	38,49
CO ₃ ⁻²	103,965	0	271,779	0	0	91,452	155,73
HCO ₃ ⁻	39,242	-1,794	38,791	0,001	0	25,205	34,41
NO ₂	21,75	0	41,159	0	0	33,956	32,29
NO ₃ ⁻	37,429	0,005	37,439	-0,001	-0,001	21,103	31,99
OH ⁻	35,969	0	35,969	0	0	17,011	29,65
AlF ₂ H	24,365	0	25,426	0	0	21,719	23,84
AlF ₃	21,008	0	21,006	0	0	18,299	20,1
AlFH ₂	27,661	0	31,148	0	0	23,619	27,48
AlH ₃	35,263	-0,003	35,261	0	0	24,741	31,76
BF ₃	17,039	0,001	17,039	0	0	13,313	15,8
BH ₃	19,142	0	19,14	0	0	13,869	17,38
C ₂ H ₄ O ₂	35,961	1,241	39,397	0	0	26,354	33,9
C ₃ H ₆ O ₂	50,544	-1,794	49,88	0	0	36,336	45,59
C ₄ H ₆	47,425	10,502	84,46	0	0	36,228	56,04
C ₄ H ₈ O ₂	66,295	-1,579	60,908	0	0	46,407	57,87
C ₅ H ₁₀ O ₂	83,293	2,295	71,31	0,001	0,001	56,31	70,3
C ₆ H ₅ OCH ₃	108,789	-0,001	91,274	-2,673	0,005	58,175	86,08
C ₆ H ₆	43,714	0	80,002	0	0	80,001	67,91
CF ₄	19,029	0	19,029	0	0	19,029	19,03
CH ₂ F ₂	16,669	0	18,614	0	0	17,517	17,6
CH ₃ F	16,479	0	16,478	0	0	17,746	16,9
CH ₄	16,655	0	16,655	0	0	16,655	16,66
CHF ₃	18,868	0	18,87	0	-0,001	17,64	18,46
CO	11,677	0	11,677	0	0	15,245	12,87
CO ₂	12,329	0	12,329	0	0	25,6	16,75
F ₂	6,053	0	6,053	0	0	12,034	8,05
H ₂	4,387	0	4,387	0	0	6,811	5,19
H ₂ CO ₃	30,07	0,002	28,979	0	0	18,666	25,91
H ₂ PO ₄ ⁻	44,494	-0,001	47,296	-0,005	0,164	43,198	45
H ₂ SO ₄	34,994	0,42	37,093	-0,16	-0,376	33,582	35,22
H ₃ PO ₄	38,476	0,147	37,173	-1,187	-0,35	36,851	37,5
HCl	15,397	0	15,397	0	0	17,477	16,09
HF	4,927	0	4,927	0	0	6,293	5,38
HPO ₄ ⁻²	72,771	0,123	68,608	0,951	0,152	65,869	69,08
HSO ₄ ⁻	42,412	0,484	40,825	-0,687	0,252	40,532	41,26
LiH	12,348	0	12,348	0	0	31,978	18,89
NaCl	24,823	0	24,823	0	0	35,868	28,5
NaH	26,656	0	26,656	0	0	53,776	35,7
O ₂	7,647	0	8,477	0	0	14,249	10,12
O ₃	30,076	0	13,448	0	0	11,328	18,28
PH ₃	29,105	0	29,103	0	0,002	30,061	29,42
PO ₄ ⁻³	231,231	-0,021	200,489	-1,31	-0,328	1004,047	478,59
SH ₂	23,067	0	22,188	0	0	22,154	22,47
SiH ₄	31,331	0	31,33	-0,001	0	31,333	31,33
SiO ₂	23,863	0	23,863	0	0	39,104	28,94
SO ₂	18,9	0	33,095	0	0	22,209	24,73
SO ₄ ⁻²	54,685	0	54,685	0	0	54,685	54,69

Tabela 142: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores PBE0/6-311G

PBE0/6-311G							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	12,725	0	12,725	0	0	12,725	12,72
BH ₄ ⁻	26,191	0	26,191	0	0	26,191	26,19
CO ₃ ⁻²	11,178	0	22,112	0	0	22,11	18,47
HCO ₃ ⁻	25,192	-3,62	23,527	0	0	10,65	19,79
NO ₂ ⁻	6,669	0	23,634	0	0	8,931	13,08
NO ₃ ⁻	23,358	0	23,356	0	0	7,092	17,94
OH ⁻	3,735	0	3,735	0	0	9,971	5,81
AlF ₂ H	19,032	0	20,846	0	0	13,283	17,72
AlF ₃	15,481	0	15,477	0	0	9,677	13,55
AlFH ₂	22,942	0	28,107	0	0	14,811	21,95
AlH ₃	32,552	-0,001	32,549	0	0	14,552	26,55
BF ₃	12,416	0,001	12,417	0	0	6,756	10,53
BH ₃	17,861	0	17,86	0	0	7,709	14,48
C ₂ H ₄ O ₂	27,74	2,934	33,146	0	0	19,155	26,68
C ₃ H ₆ O ₂	44,062	-1,006	38,685	0	0	28,83	37,19
C ₄ H ₆	40,601	8,959	78,208	0	0	19,547	46,12
C ₄ H ₈ O ₂	53,539	0,873	52,577	0	0	38,396	48,17
C ₅ H ₁₀ O ₂	67,283	2,336	62,792	0,001	0,001	47,686	59,25
C ₆ H ₅ OCH ₃	96,504	0,002	80,952	-4,491	-0,008	39,151	72,2
C ₆ H ₆	25,474	0	71,764	0	0	71,765	56,33
CF ₄	12,014	0	12,014	0	0	12,014	12,01
CH ₂ F ₂	11,428	0	12,76	0	0	12,042	12,08
CH ₃ F	12,185	0	12,184	0	0	12,491	12,29
CH ₄	12,749	0	12,749	0	0	12,749	12,75
CHF ₃	12,501	0	12,501	0	0	11,227	12,08
CO	8,259	0	8,259	0	0	13,402	9,97
CO ₂	6,568	0	6,568	0	0	23,372	12,17
F ₂	0,994	0	0,994	0	0	9,704	3,9
H ₂	0	0	0	0	0	6,859	2,29
H ₂ CO ₃	23,981	0	22,352	0	0	9,968	18,77
H ₂ PO ₄ ⁻	29,294	0,001	35,56	0	0,749	27,001	30,62
H ₂ SO ₄	27,444	0,975	32,22	-0,388	-0,948	25,812	28,49
H ₃ PO ₄	30,645	0,195	27,975	-2,628	-0,276	28,141	28,92
HCl	3,798	0	3,798	0	0	12,499	6,7
HF	1,064	0	1,064	0	0	4,394	2,17
HPO ₄ ⁻²	35,627	-0,029	29,939	1,242	0,023	28,947	31,5
HSO ₄ ⁻	31,038	1,081	27,592	-1,496	0,145	27,303	28,64
LiH	26,539	0	26,539	0	0	24,853	25,98
NaCl	15,41	0	15,41	0	0	32,79	21,2
NaH	34,794	0	34,794	0	0	49,671	39,75
O ₂	1,955	0	3,339	0	0	11,342	5,55
O ₃	25,113	0	6,437	0	0	4,473	12,01
PH ₃	23,232	0	23,23	0	0,001	20,986	22,48
PO ₄ ⁻³	31,384	0,001	30,282	-0,002	0	27,742	29,8
SH ₂	8,267	0	17,225	0	0	16,176	13,89
SiH ₄	25,512	0	25,511	0	0	25,511	25,51
SiO ₂	15,374	0	15,374	0	0	38,226	22,99
SO ₂	11,517	0	31,257	0	0	13,941	18,91
SO ₄ ⁻²	27,215	0	27,215	0	0	27,215	27,22

Tabela 143: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores PBE0/6-311G+

PBE0/6-311G+							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	18,42	0	18,42	0	0	18,42	18,42
BH ₄ ⁻	29,818	0	29,818	0	0	29,818	29,82
CO ₃ ⁻²	27,426	0	48,325	0	0	48,329	41,36
HCO ₃ ⁻	35,16	-2,689	32,163	0	0	18,225	28,52
NO ₂ ⁻	15,483	0	34,591	0	0	22,032	24,04
NO ₃ ⁻	32,437	0,001	32,44	0	0	14,444	26,44
OH ⁻	10,92	0	10,92	0	0	11,534	11,12
AlF ₂ H	22,476	0	22,79	0	0	15,66	20,31
AlF ₃	18,153	0	18,15	0	0	12,207	16,17
AlFH ₂	25,524	0	29,311	0	0	15,741	23,53
AlH ₃	33,858	-0,001	33,855	0	0	14,606	27,44
BF ₃	14,522	0,001	14,523	0	0	8,767	12,6
BH ₃	18,13	0	18,128	0	0	7,722	14,66
C ₂ H ₄ O ₂	31,514	2,99	37,146	0	0	22,12	30,26
C ₃ H ₆ O ₂	48,164	-0,965	43,365	0	0	31,905	41,14
C ₄ H ₆	41,893	9,632	82,04	0	0	29,784	51,24
C ₄ H ₈ O ₂	58,504	0,356	57,358	0	0	41,721	52,53
C ₅ H ₁₀ O ₂	72,859	2,181	67,796	0,001	0,001	51,32	63,99
C ₆ H ₅ OCH ₃	101,426	0,001	85,475	-3,745	-0,006	51,304	79,4
C ₆ H ₆	37,877	0	74,853	0	0	74,85	62,53
CF ₄	15,319	0	15,319	0	0	15,319	15,32
CH ₂ F ₂	12,979	0	15,123	0	0	13,967	14,02
CH ₃ F	13,218	0	13,218	0	0	13,991	13,48
CH ₄	13,256	0	13,256	0	0	13,256	13,26
CHF ₃	15,367	0	15,368	0	-0,001	13,783	14,84
CO	9,35	0	9,35	0	0	15,536	11,41
CO ₂	7,516	0	7,516	0	0	26,704	13,91
F ₂	2,549	0	2,549	0	0	10,786	5,29
H ₂	0	0	0	0	0	6,859	2,29
H ₂ CO ₃	26,706	0	27,241	0	0	13,658	22,54
H ₂ PO ₄ ⁻	37,132	0,001	43,992	0	0,852	37,129	39,42
H ₂ SO ₄	31,364	0,887	36,258	-0,36	-0,939	30,862	32,83
H ₃ PO ₄	35,209	0,159	32,87	-2,623	-0,223	33,689	33,92
HCl	6,077	0	6,077	0	0	12,696	8,28
HF	1,973	0	1,973	0	0	4,853	2,93
HPO ₄ ⁻²	52,236	-0,069	51,899	2,134	0,113	48,835	50,99
HSO ₄ ⁻	37,917	1,009	37,166	-1,475	0,613	36,49	37,19
LiH	26,716	0	26,716	0	0	25,077	26,17
NaCl	16,356	0	16,356	0	0	34,59	22,43
NaH	35,146	0	35,146	0	0	50,296	40,2
O ₂	4,265	0	4,449	0	0	12,931	7,21
O ₃	28,624	0	9,617	0	0	7,599	15,28
PH ₃	23,499	0	23,497	0	0,002	22,265	23,09
PO ₄ ⁻³	84,009	-0,036	78,442	-0,021	-0,01	95,965	86,14
SH ₂	14,36	0	17,424	0	0	16,281	16,02
SiH ₄	26,129	0	26,128	0	0,001	26,127	26,13
SiO ₂	16,638	0	16,638	0	0	43,944	25,74
SO ₂	13,883	0	35,107	0	0	16,785	21,92
SO ₄ ⁻²	45,461	0	45,461	0	0	45,461	45,46

Tabela 144: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores PBE0/cc-pVDZ

PBE0/cc-pVDZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	13,822	0	13,822	0	0	13,822	13,82
BH ₄ ⁻	24,946	0	24,946	0	0	24,946	24,95
CO ₃ ⁻²	11,353	0	20,962	0	0	20,96	17,76
HCO ₃ ⁻	23,474	-3,076	23,014	0	0	11,046	19,18
NO ₂ ⁻	6,712	0	22,318	0	0	9,023	12,68
NO ₃ ⁻	21,955	0	21,954	0	0	7,444	17,12
OH ⁻	3,593	0	3,593	0	0	9,244	5,48
AlF ₂ H	19,293	0	20,763	0	0	17,385	19,15
AlF ₃	15,985	0	15,983	0	0	13,331	15,1
AlFH ₂	22,449	0	26,174	0	0	19,748	22,79
AlH ₃	29,796	-0,001	29,793	0	0	20,902	26,83
BF ₃	12,649	0	12,649	0	0	8,255	11,18
BH ₃	17,479	0	17,477	0	0	9,846	14,93
C ₂ H ₄ O ₂	28,237	1,929	32,3	0	0	19,38	26,64
C ₃ H ₆ O ₂	43,058	-1,516	40,047	0	0	28,862	37,32
C ₄ H ₆	42,069	9,297	77,95	0	0	18,974	46,33
C ₄ H ₈ O ₂	55,207	-0,194	51,796	0	0	38,314	48,44
C ₅ H ₁₀ O ₂	69,937	2,414	61,6	0,001	0,001	47,501	59,68
C ₆ H ₅ OCH ₃	98,358	0,003	82,297	-4,295	-0,008	38,445	73,03
C ₆ H ₆	24,556	0	73,083	0	0	73,084	56,91
CF ₄	12,238	0	12,238	0	0	12,238	12,24
CH ₂ F ₂	12,238	0	13,026	0	0	12,543	12,6
CH ₃ F	12,71	0	12,709	0	0	13,002	12,81
CH ₄	13,078	0	13,078	0	0	13,078	13,08
CHF ₃	12,727	0	12,727	0	0	11,941	12,47
CO	8,291	0	8,291	0	0	12,372	9,65
CO ₂	7,548	0	7,548	0	0	21,029	12,04
F ₂	1,513	0	1,513	0	0	9,206	4,08
H ₂	1,186	0	1,186	0	0	6,521	2,96
H ₂ CO ₃	23,919	0	21,108	0	0	10,605	18,54
H ₂ PO ₄ ⁻	27,964	0,001	32,004	0	0,46	25,244	28,4
H ₂ SO ₄	25,331	0,714	28,662	-0,299	-0,787	23,401	25,8
H ₃ PO ₄	29,108	0,193	27,226	-1,675	-0,493	26,362	27,57
HCl	6,438	0	6,438	0	0	12,962	8,61
HF	1,63	0	1,63	0	0	4,231	2,5
HPO ₄ ⁻²	32,239	-0,012	26,759	0,817	-0,003	26,502	28,5
HSO ₄ ⁻	27,482	0,946	24,505	-1,293	0,017	24,359	25,45
LiH	30,505	0	30,505	0	0	22,436	27,82
NaCl	20,857	0	20,857	0	0	31,193	24,3
NaH	38,182	0	38,182	0	0	48,886	41,75
O ₂	2,563	0	3,536	0	0	10,923	5,67
O ₃	24,091	0	6,832	0	0	4,783	11,9
PH ₃	24,078	0	24,077	0	0,001	21,061	23,07
PO ₄ ⁻³	27,328	0,002	26,696	0	0	24,501	26,17
SH ₂	9,692	0	18,055	0	0	16,765	14,84
SiH ₄	26,909	0	26,909	0	0	26,909	26,91
SiO ₂	17,804	0	17,804	0	0	32,38	22,66
SO ₂	11,81	0	26,675	0	0	14,373	17,62
SO ₄ ⁻²	23,935	0	23,935	0	0	23,935	23,94

Tabela 145: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores PBE0/aug-cc-pVDZ

PBE0/aug-cc-pVDZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	23,465	0	23,465	0	0	23,465	23,46
BH ₄ ⁻	39,935	0	39,935	0	0	39,935	39,94
CO ₃ ⁻²	37,668	0	56,716	0	0	56,709	50,36
HCO ₃ ⁻	37,852	-1,839	37,732	0	0	24,114	33,23
NO ₂	19,856	0	38,105	0	0	28,753	28,9
NO ₃ ⁻	35,595	0,001	35,595	0	0	19,945	30,38
OH ⁻	23,386	0	23,386	0	0	17,706	21,49
AlF ₂ H	24,155	0	25,157	0	0	21,863	23,73
AlF ₃	20,668	0	20,667	0	0	17,982	19,77
AlFH ₂	27,626	0	31,112	0,001	0	25,096	27,94
AlH ₃	35,528	-0,001	35,525	0	0	28,29	33,11
BF ₃	16,852	0	16,853	0	0	12,912	15,54
BH ₃	19,181	0	19,179	0	0	14,604	17,65
C ₂ H ₄ O ₂	35,829	1,267	39,477	0	0	26,116	33,81
C ₃ H ₆ O ₂	50,555	-1,747	49,817	0	0	36,171	45,51
C ₄ H ₆	47,905	10,541	84,444	0	0	36,576	56,31
C ₄ H ₈ O ₂	66,206	-1,576	60,937	0	0	46,226	57,79
C ₅ H ₁₀ O ₂	83,18	2,26	71,332	0,001	0,001	56,119	70,21
C ₆ H ₅ OCH ₃	108,909	0,002	91,235	-2,607	-0,005	58,355	86,17
C ₆ H ₆	44,01	0	80,185	0	0	80,184	68,13
CF ₄	18,497	0	18,497	0	0	18,497	18,5
CH ₂ F ₂	16,309	0	18,43	0	0	17,304	17,35
CH ₃ F	16,286	0	16,285	0	0	17,815	16,8
CH ₄	16,753	0	16,753	0	0	16,753	16,75
CHF ₃	18,469	0	18,471	0	-0,001	17,218	18,05
CO	11,608	0	11,608	0	0	15,2	12,81
CO ₂	11,962	0	11,962	0	0	25,472	16,47
F ₂	5,366	0	5,366	0	0	11,521	7,42
H ₂	4,554	0	4,554	0	0	6,905	5,34
H ₂ CO ₃	29,874	-0,001	28,783	0	0	18,305	25,65
H ₂ PO ₄ ⁻	44,096	0	47,2	0	0,271	42,861	44,72
H ₂ SO ₄	34,883	0,467	37,227	-0,182	-0,419	33,458	35,19
H ₃ PO ₄	38,554	0,169	37,095	-1,342	-0,356	36,906	37,52
HCl	15,432	0	15,432	0	0	17,681	16,18
HF	4,383	0	4,383	0	0	6,3	5,02
HPO ₄ ⁻²	63,959	0,051	59,062	-0,359	0,018	58,491	60,5
HSO ₄ ⁻	41,947	0,506	40,277	-0,716	0,218	40,006	40,74
LiH	30,988	0	30,988	0	0	26,127	29,37
NaCl	27,397	0	27,397	0	0	35,858	30,22
NaH	38,41	0	38,41	0	0	55,661	44,16
O ₂	7,785	0	7,097	0	0	13,725	9,54
O ₃	29,598	0	12,858	0	0	10,687	17,71
PH ₃	29,793	0	29,79	0	0,002	31,181	30,25
PO ₄ ⁻³	99,614	-0,049	92,769	-0,014	-0,019	126,936	106,44
SH ₂	23,832	0	23,492	0	0	23,313	23,55
SiH ₄	32,257	0	32,256	0	0	32,256	32,26
SiO ₂	23,523	0	23,523	0	0	39,032	28,69
SO ₂	18,441	0	33,251	0	0	22,151	24,61
SO ₄ ⁻²	0	-0,001	69,432	0,004	0	69,431	-4058,93

Tabela 146: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores PBE0/cc-pVTZ

PBE0/cc-pVTZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	18,065	0	18,065	0	0	18,065	18,07
BH ₄ ⁻	30,028	0	30,028	0	0	30,028	30,03
CO ₃ ⁻²	16,934	0	27,889	0	0	27,886	24,24
HCO ₃ ⁻	28,378	-2,642	27,968	0	0	15,787	24,04
NO ₂ ⁻	9,942	0	26,165	0	0	12,827	16,31
NO ₃ ⁻	26,068	0	26,067	0	0	11,511	21,22
OH ⁻	6,769	0	6,769	0	0	11,421	8,32
AlF ₂ H	21,932	0	23,219	0	0	20,117	21,76
AlF ₃	18,384	-0,001	18,383	0	0	16,063	17,61
AlFH ₂	25,186	0	28,786	0	0	23,053	25,67
AlH ₃	32,516	-0,002	32,511	0	0	25,58	30,2
BF ₃	14,885	0,001	14,885	0	0	10,803	13,52
BH ₃	18,532	0	18,53	0	0	12,397	16,49
C ₂ H ₄ O ₂	32,091	1,522	36,024	0	0	23,091	30,4
C ₃ H ₆ O ₂	47,164	-1,633	45,54	0	0	33,105	41,94
C ₄ H ₆	44,857	9,934	81,468	0	0	27,06	51,13
C ₄ H ₈ O ₂	61,666	-1,083	56,939	0	0	43,039	53,88
C ₅ H ₁₀ O ₂	78,019	2,314	67,124	0,001	0,001	52,72	65,95
C ₆ H ₅ OCH ₃	104,325	0,003	87,113	-3,364	-0,007	48,625	80,02
C ₆ H ₆	33,933	0	76,623	0	0	76,625	62,39
CF ₄	15,412	0	15,412	0	0	15,412	15,41
CH ₂ F ₂	14,297	0	15,712	0	0	14,993	15
CH ₃ F	14,723	0	14,722	0	0	15,37	14,94
CH ₄	15,189	0	15,189	0	0	15,189	15,19
CHF ₃	15,628	0	15,628	0	0	14,483	15,25
CO	10,092	0	10,092	0	0	13,794	11,33
CO ₂	9,845	0	9,845	0	0	23,218	14,3
F ₂	2,924	0	2,924	0	0	10,233	5,36
H ₂	2,683	0	2,683	0	0	6,815	4,06
H ₂ CO ₃	26,749	0	24,943	0	0	14,543	22,08
H ₂ PO ₄ ⁻	34,068	0	37,521	0	0,376	32,013	34,53
H ₂ SO ₄	29,944	0,598	32,824	-0,249	-0,684	28,419	30,4
H ₃ PO ₄	33,713	0,165	32,102	-1,49	-0,411	31,563	32,46
HCl	10,364	0	10,364	0	0	15,091	11,94
HF	2,763	0	2,763	0	0	5,273	3,6
HPO ₄ ⁻²	39,632	-0,008	34,955	0,665	0	34,651	36,41
HSO ₄ ⁻	32,964	0,785	30,576	-1,078	0,027	30,443	31,33
LiH	29,702	0	29,702	0	0	24,937	28,11
NaCl	24,977	0	24,977	0	0	33,738	27,9
NaH	37,823	0	37,823	0	0	51,915	42,52
O ₂	4,364	0	4,879	0	0	12,072	7,1
O ₃	26,4	0	9,059	0	0	6,889	14,12
PH ₃	26,977	0	26,976	0	0,001	25,671	26,54
PO ₄ ⁻³	37,177	0,001	36,479	-0,001	0	34,56	36,07
SH ₂	15,479	0	20,63	0	0	19,927	18,68
SiH ₄	29,978	0	29,978	-0,001	0	29,978	29,98
SiO ₂	21,465	0	21,465	0	0	34,9	25,94
SO ₂	15,058	0	29,515	0	0	18,231	20,93
SO ₄ ⁻²	31,326	0	31,326	0	0	31,326	31,33

Tabela 147: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores PBE0/aug-cc-pVTZ

PBE0/aug-cc-pVTZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	24,04	0,00	24,04	0,00	0,00	24,04	24,04
BH ₄ ⁻	41,32	0,00	41,32	0,00	0,00	41,32	41,32
CO ₃ ⁻²	42,37	0,00	66,60	0,00	0,00	66,57	58,52
HCO ₃ ⁻	38,99	-1,81	39,05	0,00	0,00	25,15	34,40
NO ₂ ⁻	21,53	0,00	39,89	0,00	0,00	31,55	30,99
NO ₃ ⁻	36,97	0,00	36,96	0,00	0,00	21,07	31,66
OH ⁻	27,77	0,00	27,77	0,00	0,00	20,42	25,32
AlF ₂ H	24,61	0,00	25,87	0,00	0,00	22,61	24,36
AlF ₃	21,42	0,00	21,42	0,00	0,00	18,88	20,57
AlFH ₂	27,89	0,01	31,49	0,00	0,00	25,57	28,32
AlH ₃	35,49	0,00	35,47	0,00	0,00	28,26	33,07
BF ₃	17,14	0,00	17,14	0,00	0,00	13,38	15,89
BH ₃	19,21	0,00	19,21	0,00	0,00	14,69	17,71
C ₂ H ₄ O ₂	36,14	1,21	39,54	0,00	0,00	26,43	34,04
C ₃ H ₆ O ₂	50,68	-1,83	50,06	0,00	0,00	36,43	45,72
C ₄ H ₆	48,47	10,55	84,50	0,00	0,00	36,62	56,53
C ₄ H ₈ O ₂	66,49	-1,60	61,03	0,00	0,00	46,49	58,00
C ₅ H ₁₀ O ₂	83,50	2,32	71,43	0,00	0,00	56,40	70,44
C ₆ H ₅ OCH ₃	109,16	0,00	91,51	-2,62	-0,01	58,36	86,35
C ₆ H ₆	43,99	0,00	80,52	0,00	0,00	80,52	68,34
CF ₄	19,05	0,00	19,05	0,00	0,00	19,05	19,05
CH ₂ F ₂	16,81	0,00	18,74	0,00	0,00	17,69	17,75
CH ₃ F	16,64	0,00	16,64	0,00	0,00	18,01	17,10
CH ₄	16,88	0,00	16,88	0,00	0,00	16,88	16,88
CHF ₃	18,93	0,00	18,93	0,00	0,00	17,73	18,53
CO	11,90	0,00	11,90	0,00	0,00	15,26	13,02
CO ₂	12,55	0,00	12,55	0,00	0,00	25,54	16,88
F ₂	6,05	0,00	6,05	0,00	0,00	11,97	8,02
H ₂	4,91	0,00	4,91	0,00	0,00	6,78	5,53
H ₂ CO ₃	30,30	0,00	29,01	0,00	0,00	18,73	26,01
H ₂ PO ₄ ⁻	44,89	0,00	47,61	0,00	0,15	43,52	45,34
H ₂ SO ₄	35,16	0,42	37,25	-0,16	-0,36	33,70	35,37
H ₃ PO ₄	38,70	0,15	37,37	-1,18	-0,36	37,01	37,69
HCl	16,65	0,00	16,65	0,00	0,00	18,41	17,24
HF	4,98	0,00	4,98	0,00	0,00	6,42	5,46
HPO ₄ ⁻²	67,43	0,04	62,80	0,03	0,04	61,74	63,99
HSO ₄ ⁻	42,62	0,50	40,92	-0,71	0,23	40,64	41,39
LiH	30,33	0,00	30,33	0,00	0,00	27,09	29,25
NaCl	29,15	0,00	29,15	0,00	0,00	36,97	31,76
NaH	38,33	0,00	38,33	0,00	0,00	54,69	43,78
O ₂	8,42	0,00	7,68	0,00	0,00	14,21	10,10
O ₃	30,02	0,00	13,42	0,00	0,00	11,31	18,25
PH ₃	30,24	0,00	30,24	0,00	0,00	31,87	30,79
PO ₄ ⁻³	127,09	-0,08	116,41	0,02	-0,08	245,63	163,04
SH ₂	25,01	0,00	24,39	0,00	0,00	24,32	24,57
SiH ₄	32,34	0,04	32,29	0,01	-0,02	32,29	32,31
SiO ₂	24,95	0,00	24,95	0,00	0,00	39,04	29,65
SO ₂	19,21	0,00	33,26	0,00	0,00	22,61	25,03
SO ₄ ⁻²	0,00	-2,28	-48,98	0,33	0,00	-48,98	-32,66

Tabela 148: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores PBE0/pc-3

PBE0/pc-3							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	23,122	0	23,122	0	0	23,122	23,12
BH ₄ ⁻	37,287	0	37,287	0	0	37,287	37,29
CO ₃ ⁻²	33,567	0	49,549	0	0	49,544	44,22
HCO ₃ ⁻	37,238	-1,862	36,927	0	0	23,461	32,54
NO ₂ ⁻	17,278	0	36,06	0	0	24,287	25,88
NO ₃ ⁻	34,863	0	34,864	0	0	19,251	29,66
OH ⁻	19,415	0	19,415	0	0	15,871	18,23
AlF ₂ H	24,026	0	25,33	0	0	21,542	23,63
AlF ₃	20,837	0	20,835	0	0	17,959	19,88
AlFH ₂	27,317	0	31,039	0	0	23,661	27,34
AlH ₃	35,126	-0,002	35,123	0	0	24,971	31,74
BF ₃	16,91	0,001	16,91	0	0	13,062	15,63
BH ₃	19,095	0	19,093	0	0	13,768	17,32
C ₂ H ₄ O ₂	35,696	1,261	39,26	0	0	26,08	33,68
C ₃ H ₆ O ₂	50,416	-1,754	49,704	0	0	36,156	45,43
C ₄ H ₆	47,474	10,518	84,44	0	0	35,874	55,93
C ₄ H ₈ O ₂	66,116	-1,595	60,815	0	0	46,253	57,73
C ₅ H ₁₀ O ₂	83,137	2,267	71,212	0,001	0,001	56,173	70,17
C ₆ H ₅ OCH ₃	108,723	0,002	91,186	-2,669	-0,005	58,02	85,98
C ₆ H ₆	43,561	0	79,987	0	0	79,987	67,84
CF ₄	18,703	0	18,703	0	0	18,703	18,7
CH ₂ F ₂	16,377	0	18,423	0	0	17,328	17,38
CH ₃ F	16,31	0	16,31	0	0	17,587	16,74
CH ₄	16,577	0	16,577	0	0	16,577	16,58
CHF ₃	18,604	0	18,606	0	-0,001	17,31	18,17
CO	11,571	0	11,571	0	0	15,195	12,78
CO ₂	12,031	0	12,031	0	0	25,533	16,53
F ₂	5,465	0	5,465	0	0	11,783	7,57
H ₂	4,306	0	4,306	0	0	6,794	5,14
H ₂ CO ₃	29,731	0	28,828	0	0	18,27	25,61
H ₂ PO ₄ ⁻	42,697	0	45,717	0	0,35	41,335	43,25
H ₂ SO ₄	34,391	0,47	36,678	-0,189	-0,518	33,08	34,72
H ₃ PO ₄	38,013	0,135	36,543	-1,329	-0,313	36,386	36,98
HCl	13,662	0	13,662	0	0	16,971	14,77
HF	4,575	0	4,575	0	0	6,215	5,12
HPO ₄ ⁻²	56,877	0,027	52,851	-0,016	0,013	52,257	54
HSO ₄ ⁻	40,771	0,507	39,104	-0,703	0,133	38,909	39,59
LiH	27,661	0	27,661	0	0	26,695	27,34
NaCl	23,169	0	23,169	0	0	35,885	27,41
NaH	35,135	0	35,135	0	0	52,667	40,98
O ₂	7,666	0	7,019	0	0	13,839	9,51
O ₃	29,611	0	12,678	0	0	10,504	17,6
PH ₃	28,957	0	28,955	0	0,002	29,675	29,2
PO ₄ ⁻³	69,816	-0,013	67,817	-0,013	-0,002	71,599	69,74
SH ₂	22,389	0	22,335	0	0	22,177	22,3
SiH ₄	31,17	0	31,169	-0,001	0	31,169	31,17
SiO ₂	23,077	0	23,077	0	0	38,991	28,38
SO ₂	18,014	0	32,488	0	0	21,444	23,98
SO ₄ ⁻²	47,063	0	47,063	0	0	47,063	47,06

Tabela 149: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores PBE0/aug-pc-3

PBE0/aug-pc-3							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	24,368	0	24,368	0	0	24,368	24,37
BH ₄ ⁻	41,773	0	41,773	0	0	41,773	41,77
CO ₃ ⁻²	299,987	0	249,728	0	-0,004	299,058	282,92
HCO ₃ ⁻	39,984	-1,768	39,963	0	-0,001	26,199	35,38
NO ₂ ⁻	25,183	0	42,981	0	0	37,627	35,26
NO ₃ ⁻	38,261	0,017	38,266	-0,001	0,001	22,187	32,9
OH ⁻	45,205	0	45,205	0	0	25,846	38,75
AlF ₂ H	24,688	0	26,008	0	0	22,795	24,5
AlF ₃	21,551	0	21,549	0	0	19,135	20,75
AlFH ₂	27,915	0	31,608	0	0	25,664	28,4
AlH ₃	35,522	-0,002	35,518	0	0	28,24	33,09
BF ₃	17,189	0,001	17,188	0	0	13,562	15,98
BH ₃	19,196	0	19,195	0	0	14,677	17,69
C ₂ H ₄ O ₂	36,213	1,193	39,522	0	0	26,558	34,1
C ₃ H ₆ O ₂	50,658	-1,832	50,063	0	0	36,495	45,74
C ₄ H ₆	48,628	10,53	84,437	0	0	36,661	56,58
C ₄ H ₈ O ₂	0	0	0	0	0	0	0
C ₅ H ₁₀ O ₂	0	0	0	0	0	0	0
C ₆ H ₅ OCH ₃	0	0	0	0	0	0	0
C ₆ H ₆	43,957	0	80,559	0	0	80,559	68,36
CF ₄	19,225	0	19,225	0	0	19,225	19,23
CH ₂ F ₂	16,968	0	18,821	0	0	17,79	17,86
CH ₃ F	16,745	0	16,745	0	0	18,024	17,17
CH ₄	16,892	0	16,892	0	0	16,892	16,89
CHF ₃	19,066	0	19,066	0	-0,001	17,892	18,67
CO	11,962	0	11,962	0	0	15,243	13,06
CO ₂	12,74	0	12,74	0	0	25,56	17,01
F ₂	6,419	0	6,419	0	0	12,258	8,37
H ₂	4,903	0	4,903	0	0	6,783	5,53
H ₂ CO ₃	30,409	-0,003	29,098	0	0	18,906	26,14
H ₂ PO ₄ ⁻	45,325	-0,011	47,824	-0,003	0,058	43,787	45,65
H ₂ SO ₄	35,183	0,41	37,209	-0,155	-0,355	33,696	35,36
H ₃ PO ₄	38,682	0,146	37,411	-1,127	-0,362	36,993	37,7
HCl	17,155	0	17,155	0	0	18,713	17,67
HF	5,371	0	5,371	0	0	6,472	5,74
HPO ₄ ⁻²	75,859	0,138	72,597	1,205	0,237	69,878	72,78
HSO ₄ ⁻	43,012	0,48	41,306	-0,678	0,25	41,014	41,78
LiH	30,316	0	30,316	0	0	27,077	29,24
NaCl	29,689	0	29,689	0	0	37,27	32,22
NaH	37,834	0	37,834	0	0	53,463	43,04
O ₂	8,797	0	7,97	0	0	14,554	10,44
O ₃	30,221	0	13,725	0	0	11,618	18,52
PH ₃	30,294	0	30,293	0	0,002	32,038	30,87
PO ₄ ⁻³	1509,473	-2,967	1367,73	0,457	441,585	2214,132	1697,11
SH ₂	25,443	0	24,696	0	0	24,667	24,94
SiH ₄	32,183	0	32,182	0	0	32,183	32,18
SiO ₂	25,204	0	25,204	0	0	38,977	29,79
SO ₂	19,551	0	33,105	0	0	22,777	25,14
SO ₄ ⁻²	60,54	0	60,54	0	0	60,54	60,54

Tabela 150: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores HF/MCG

HF/MCG							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	17,05	0	17,05	0	0	17,05	17,05
BH ₄ ⁻	29,992	0	29,992	0	0	29,992	29,99
CO ₃ ⁻²	30,512	0	30,512	0	0	20,605	27,21
HCO ₃ ⁻	28,823	-2,052	26,369	0	0	17,643	24,28
NO ₂ ⁻	12,433	0	28,657	0	0	16,69	19,26
NO ₃ ⁻	27,492	0	27,492	0	0	13,936	22,97
OH ⁻	9,446	0	9,446	0	0	11,855	10,25
AlF ₂ H	18,36	0	20,871	0	0	19,906	19,71
AlF ₃	16,112	0	16,112	0	0	14,009	15,41
AlFH ₂	21,709	0	23,553	0	0	26,959	24,07
AlH ₃	31,163	0	31,163	0	0	24,648	28,99
BF ₃	13,263	0	13,263	0	0	9,984	12,17
BH ₃	17,638	0	17,638	0	0	11,258	15,51
C ₂ H ₄ O ₂	30,516	2,125	33,984	0	0,001	23,143	29,21
C ₃ H ₆ O ₂	43,446	1,363	44,297	0,001	0,001	32,753	40,17
C ₄ H ₆	62,1	-22,593	62,88	0	0	32,677	52,55
C ₄ H ₈ O ₂	57,817	0,055	54,333	0,001	0	42,308	51,49
C ₅ H ₁₀ O ₂	72,722	1,607	64,344	0,001	0,001	51,649	62,9
C ₆ H ₅ OCH ₃	99,414	0	85,418	-2,858	-0,001	53,975	79,6
C ₆ H ₆	75,131	0	75,131	0	0	41,081	63,78
CF ₄	14,491	0	14,491	0	0	14,491	14,49
CH ₂ F ₂	13,527	0	14,949	0	0	14,284	14,25
CH ₃ F	14,143	0	14,143	0	0	14,84	14,38
CH ₄	14,906	0	14,906	0	0	14,906	14,91
CHF ₃	14,722	0	14,722	0	0	13,702	14,38
CO	9,742	0	9,742	0	0	13,894	11,13
CO ₂	9,353	0	9,353	0	0	22,609	13,77
F ₂	3,278	0	3,278	0	0	11,236	5,93
H ₂	2,822	0	2,822	0	0	6,405	4,02
H ₂ CO ₃	23,955	0	24,309	0	0	15,258	21,17
H ₂ PO ₄ ⁻	33,417	0,007	36,265	-0,001	-0,712	32,698	34,13
H ₂ SO ₄	28,203	-0,003	30,628	0,001	-0,787	27,502	28,78
H ₃ PO ₄	31,546	-0,426	30,895	-1,132	0,43	30,152	30,86
HCl	13,178	0	13,178	0	0	15,819	14,06
HF	2,883	0	2,883	0	0	4,991	3,59
HPO ₄ ⁻²	39,808	0,001	38,172	0,839	0	37,463	38,48
HSO ₄ ⁻	31,409	1,222	31,212	-0,001	0	30,823	31,15
LiH	4,271	0	4,271	0	0	26,385	11,64
NaCl	18,195	0	18,195	0	0	25,218	20,54
NaH	8,683	0	8,683	0	0	40,205	19,19
O ₂	5,543	0	5,653	0	0	13,277	8,16
O ₃	8,731	0	32,276	0	0	10,127	17,04
PH ₃	27,901	0	27,901	0	0	27,631	27,81
PO ₄ ⁻³	42,996	0	42,996	0	0	42,996	43
SH ₂	19,307	0	21,382	0	0	20,438	20,38
SiH ₄	28,835	0	28,835	0	0	28,835	28,83
SiO ₂	20,502	0	20,502	0	0	30,669	23,89
SO ₂	16,276	0	28,384	0	0	18,557	21,07
SO ₄ ⁻²	33,805	0	33,805	0	0	33,805	33,8

Tabela 151: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores HF/aMCG-2d1f

HF/aMCG-2d1f							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	18,748	0	18,748	0	0	18,748	18,75
BH ₄ ⁻	32,798	0	32,798	0	0	32,798	32,8
CO ₃ ⁻²	41,647	0	41,647	0	0	30,106	37,8
HCO ₃ ⁻	31,013	-1,978	27,848	0	0	19,483	26,11
NO ₂ ⁻	15,947	0	31,714	0	0	21,167	22,94
NO ₃ ⁻	29,549	0	29,549	0	0	16,478	25,19
OH ⁻	15,14	0	15,14	0	0	11,626	13,97
AlF ₂ H	15,886	0	19,215	0	0	20,18	18,43
AlF ₃	15,348	0	15,348	0	0	12,709	14,47
AlFH ₂	16,151	0	26,803	0	0	22,534	21,83
AlH ₃	30,874	0	30,874	0	0	15,714	25,82
BF ₃	13,916	0	13,916	0	0	10,945	12,93
BH ₃	17,733	0	17,733	0	0	12,698	16,05
C ₂ H ₄ O ₂	30,463	2,204	34,266	0	0,001	23,377	29,37
C ₃ H ₆ O ₂	43,278	1,378	44,545	0,001	0,001	32,938	40,25
C ₄ H ₆	62,38	-23,285	62,249	0	0	33,956	52,86
C ₄ H ₈ O ₂	57,523	0,019	54,612	0,001	0	42,514	51,55
C ₅ H ₁₀ O ₂	72,3	1,584	64,657	0,001	0,001	51,873	62,94
C ₆ H ₅ OCH ₃	99,003	0	85,472	-2,891	-0,001	55,13	79,87
C ₆ H ₆	74,68	0	74,679	0	0	42,726	64,03
CF ₄	15,515	0	15,515	0	0	15,515	15,51
CH ₂ F ₂	14,1	0	15,148	0	0	14,592	14,61
CH ₃ F	14,344	0	14,344	0	0	14,602	14,43
CH ₄	14,419	0	14,419	0	0	14,419	14,42
CHF ₃	15,378	0	15,378	0	0	14,528	15,09
CO	9,823	0	9,823	0	0	14,146	11,26
CO ₂	9,573	0	9,573	0	0	22,92	14,02
F ₂	4,31	0	4,31	0	0	11,731	6,78
H ₂	2,082	0	2,082	0	0	6,483	3,55
H ₂ CO ₃	24,05	0	24,688	0	0	15,563	21,43
H ₂ PO ₄ ⁻	33,598	0,038	36,91	0,005	0,785	33,434	34,65
H ₂ SO ₄	28,305	-0,003	30,752	0,001	-0,757	27,706	28,92
H ₃ PO ₄	29,165	0	29,165	0	0	34,313	30,88
HCl	10,801	0	10,801	0	0	14,118	11,91
HF	3,293	0	3,293	0	0	4,929	3,84
HPO ₄ ⁻²	44,144	0,002	43,726	-1,088	0,003	42,727	43,53
HSO ₄ ⁻	32,668	1,145	32,541	-0,001	0	32,224	32,48
LiH	2,697	0	2,697	0	0	28,625	11,34
NaCl	17,478	0	17,478	0	0	26,325	20,43
NaH	19,241	0	19,241	0	0	39,628	26,04
O ₂	6,223	0	6,118	0	0	13,615	8,65
O ₃	9,496	0	32,676	0	0	10,788	17,65
PH ₃	25,147	0	25,147	0	0	23,334	24,54
PO ₄ ⁻³	74,259	0	74,259	0	0	74,259	74,26
SH ₂	18,149	0	18,714	0	0	16,932	17,93
SiH ₄	25,574	0	25,574	0	0	25,574	25,57
SiO ₂	17,314	0	17,314	0	0	31,5	22,04
SO ₂	16,145	0	29,547	0	0	17,999	21,23
SO ₄ ⁻²	39,207	0	39,207	0	0	39,207	39,21

Tabela 152: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores HF/aMCG-3d2f1g

HF/aMCG-3d2f1g							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	19,403	0	19,403	0	0	19,403	19,4
BH ₄ ⁻	33,507	0	33,507	0	0	33,507	33,51
CO ₃ ⁻²	44,21	0	44,21	0	0	32,89	40,44
HCO ₃ ⁻	31,973	-1,703	29,93	0	0	21,401	27,77
NO ₂ ⁻	17,66	0	32,59	0	0	22,839	24,36
NO ₃ ⁻	30,961	0	30,961	0	0	18,383	26,77
OH ⁻	18,493	0	18,493	0	0	14,24	17,08
AlF ₂ H	18,925	0	21,439	0	0	20,429	20,26
AlF ₃	16,794	0	16,794	0	0	15,044	16,21
AlFH ₂	21,369	0	24,046	0	0	27,507	24,31
AlH ₃	31,803	0	31,803	0	0	23,195	28,93
BF ₃	14,234	0	14,234	0	0	11,539	13,34
BH ₃	17,913	0	17,913	0	0	13,123	16,32
C ₂ H ₄ O ₂	31,987	1,804	34,739	0	0,001	24,454	30,39
C ₃ H ₆ O ₂	45,624	-1,178	44,387	0	0	33,924	41,31
C ₄ H ₆	62,69	-21,931	64,706	0	0	36,258	54,55
C ₄ H ₈ O ₂	59,491	0,071	55,071	0,001	0	43,431	52,66
C ₅ H ₁₀ O ₂	74,509	1,648	65,162	0,001	0,001	52,779	64,15
C ₆ H ₅ OCH ₃	101,419	0	87,094	-2,58	-0,001	56,81	81,77
C ₆ H ₆	77,024	0	77,023	0	0	44,436	66,16
CF ₄	16,308	0	16,308	0	0	16,308	16,31
CH ₂ F ₂	14,956	0	16,171	0	0	15,491	15,54
CH ₃ F	15,117	0	15,117	0	0	15,964	15,4
CH ₄	15,679	0	15,679	0	0	15,679	15,68
CHF ₃	16,209	0	16,209	0	0	15,399	15,94
CO	10,899	0	10,899	0	0	14,002	11,93
CO ₂	11,361	0	11,361	0	0	22,72	15,15
F ₂	5,23	0	5,23	0	0	12,171	7,54
H ₂	4,191	0	4,191	0	0	6,38	4,92
H ₂ CO ₃	25,478	0	25,27	0	0	16,803	22,52
H ₂ PO ₄ ⁻	36,058	0,006	38,402	-0,001	-0,536	35,267	36,58
H ₂ SO ₄	29,762	-0,002	31,645	0,001	-0,573	28,757	30,05
H ₃ PO ₄	32,525	-0,381	31,964	-0,953	0,355	31,06	31,85
HCl	14,648	0	14,648	0	0	16,801	15,37
HF	4,198	0	4,198	0	0	5,476	4,62
HPO ₄ ⁻²	47,117	0,001	46,028	0,699	0	45,392	46,18
HSO ₄ ⁻	34,484	0,923	33,985	0	0	33,566	34,01
LiH	11,655	0	11,655	0	0	24,411	15,91
NaCl	22,155	0	22,155	0	0	27,679	24
NaH	22,23	0	22,23	0	0	39,714	28,06
O ₂	7,314	0	7,233	0	0	14,008	9,52
O ₃	10,547	0	32,927	0	0	11,779	18,42
PH ₃	28,15	0	28,15	0	0	28,34	28,21
PO ₄ ⁻³	77,475	0	77,475	0	0	77,475	77,47
SH ₂	22,007	0	21,59	0	0	20,961	21,52
SiH ₄	28,867	0	28,867	0	0	28,867	28,87
SiO ₂	20,858	0	20,858	0	0	31,116	24,28
SO ₂	17,899	0	29,104	0	0	19,798	22,27
SO ₄ ⁻²	39,601	0	39,601	0	0	39,601	39,6

Tabela 153: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores HF/6-311G

HF/cc-pVDZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	10,557	0	10,557	0	0	10,557	10,56
BH ₄ ⁻	24,662	0	24,662	0	0	24,662	24,66
CO ₃ ⁻²	19,12	0	19,12	0	0	9,953	16,06
HCO ₃ ⁻	22,623	-3,318	19,02	0	0	9,599	17,08
NO ₂ ⁻	6,19	0	22,877	0	0	8,263	12,44
NO ₃ ⁻	21,566	0	21,566	0	0	6,486	16,54
OH ⁻	3,012	0	3,012	0	0	9,144	5,06
AlF ₂ H	10,415	0	17,361	0	0	14,569	14,11
AlF ₃	11,162	0	11,162	0	0	6,847	9,72
AlFH ₂	11,914	0	19,016	0	0	25,505	18,81
AlH ₃	30,185	0	30,185	0	0	12,012	24,13
BF ₃	10,181	0	10,181	0	0	5,553	8,64
BH ₃	17,108	0	17,108	0	0	6,674	13,63
C ₂ H ₄ O ₂	24,323	3,017	30,853	0	0,001	18,135	24,44
C ₃ H ₆ O ₂	35,246	1,671	40,543	0	0,001	27,484	34,42
C ₄ H ₆	59,714	-22,504	57,737	0	0	19,149	45,53
C ₄ H ₈ O ₂	47,681	0,261	49,946	0,001	0	36,734	44,79
C ₅ H ₁₀ O ₂	60,919	1,553	59,151	0,001	0,001	45,716	55,26
C ₆ H ₅ OCH ₃	90,105	0	77,583	-4,619	-0,002	37,463	68,38
C ₆ H ₆	69,223	0	69,223	0	0	25,078	54,51
CF ₄	10,395	0	10,395	0	0	10,395	10,39
CH ₂ F ₂	10,561	0	11,195	0	0	10,879	10,88
CH ₃ F	11,544	0	11,544	0	0	11,437	11,51
CH ₄	12,395	0	12,395	0	0	12,395	12,4
CHF ₃	10,845	0	10,845	0	0	10,023	10,57
CO	7,756	0	7,756	0	0	12,789	9,43
CO ₂	5,894	0	5,894	0	0	21,757	11,18
F ₂	0,991	0	0,991	0	0	10,792	4,26
H ₂	0	0	0	0	0	6,637	2,21
H ₂ CO ₃	20,138	0	20,03	0	0	9,041	16,4
H ₂ PO ₄ ⁻	23,235	0,016	29,384	-0,003	-1,562	22,202	24,94
H ₂ SO ₄	22,916	-0,005	27,375	0,003	-1,345	21,828	24,04
H ₃ PO ₄	25,17	-0,968	23,657	-2,476	0,757	23,194	24,01
HCl	3,575	0	3,575	0	0	12,398	6,52
HF	0,976	0	0,976	0	0	4,006	1,99
HPO ₄ ⁻²	27,628	0,001	24,802	2,138	0	23,809	25,41
HSO ₄ ⁻	25,183	2,038	24,2	-0,001	0	22,951	24,11
LiH	20,145	0	20,145	0	0	20,248	20,18
NaCl	11,539	0	11,539	0	0	22,091	15,06
NaH	25,941	0	25,941	0	0	36,055	29,31
O ₂	3,081	0	1,945	0	0	12,235	5,75
O ₃	4,116	0	30,161	0	0	6,03	13,44
PH ₃	23,225	0	23,225	0	0	18,487	21,65
PO ₄ ⁻³	24,753	0	24,753	0	0	24,753	24,75
SH ₂	7,799	0	17,543	0	0	15,234	13,53
SiH ₄	24,059	0	24,059	0	0	24,059	24,06
SiO ₂	12,868	0	12,868	0	0	32,749	19,49
SO ₂	11,134	0	30,603	0	0	12,57	18,1
SO ₄ ⁻²	22,962	0	22,962	0	0	22,962	22,96

Tabela 154: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores HF/6-311G+

HF/6-311G+							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	14,379	0	14,379	0	0	14,379	14,38
BH ₄ ⁻	26,805	0	26,805	0	0	26,805	26,8
CO ₃ ⁻²	33,942	0	33,942	0	0	21,441	29,77
HCO ₃ ⁻	29,656	-2,918	24,631	0	0	15,154	23,15
NO ₂ ⁻	12,314	0	29,811	0	0	16,321	19,48
NO ₃ ⁻	27,774	0	27,774	0	0	12,339	22,63
OH ⁻	8,135	0	8,135	0	0	10,392	8,89
AlF ₂ H	12,676	0	18,784	0	0	17,584	16,35
AlF ₃	13,134	0	13,134	0	0	8,78	11,68
AlFH ₂	12,929	0	21,058	0	0	26,637	20,21
AlH ₃	31,265	0	31,265	0	0	12,054	24,86
BF ₃	11,58	0	11,58	0	0	7,052	10,07
BH ₃	17,245	0	17,245	0	0	6,657	13,72
C ₂ H ₄ O ₂	27,153	3,132	33,767	0	0,001	20,428	27,12
C ₃ H ₆ O ₂	38,629	1,516	43,625	0	0,001	29,871	37,38
C ₄ H ₆	61,952	-23,907	60,188	0	0	29,863	50,67
C ₄ H ₈ O ₂	51,547	-0,028	53,231	0,001	0	39,294	48,02
C ₅ H ₁₀ O ₂	65,009	1,396	62,814	0,001	0,001	48,504	58,78
C ₆ H ₅ OCH ₃	94,588	0	81,816	-3,531	-0,002	49,782	75,4
C ₆ H ₆	72,166	0	72,166	0	0	38,292	60,87
CF ₄	12,749	0	12,749	0	0	12,749	12,75
CH ₂ F ₂	11,75	0	12,899	0	0	12,283	12,31
CH ₃ F	12,375	0	12,375	0	0	12,582	12,44
CH ₄	12,76	0	12,76	0	0	12,76	12,76
CHF ₃	12,88	0	12,88	0	0	11,831	12,53
CO	8,494	0	8,494	0	0	14,419	10,47
CO ₂	6,601	0	6,601	0	0	24,398	12,53
F ₂	2,125	0	2,125	0	0	11,693	5,31
H ₂	0	0	0	0	0	6,637	2,21
H ₂ CO ₃	22,065	0	23,718	0	0	11,816	19,2
H ₂ PO ₄ ⁻	28,8	0,016	35,211	-0,002	-1,463	29,296	31,1
H ₂ SO ₄	25,81	-0,005	30,289	0,002	-1,229	25,569	27,22
H ₃ PO ₄	28,545	-0,842	27,276	-2,336	0,821	27,253	27,69
HCl	5,435	0	5,435	0	0	12,598	7,82
HF	1,588	0	1,588	0	0	4,321	2,5
HPO ₄ ⁻²	37,9	0,001	38,229	2,389	0	36,223	37,45
HSO ₄ ⁻	30,174	1,84	30,385	-0,001	0	29,697	30,09
LiH	20,207	0	20,207	0	0	20,365	20,26
NaCl	12,529	0	12,529	0	0	23,379	16,15
NaH	26,064	0	26,064	0	0	36,41	29,51
O ₂	3,564	0	4,157	0	0	13,49	7,07
O ₃	6,917	0	33,332	0	0	8,176	16,14
PH ₃	23,459	0	23,459	0	0	19,961	22,29
PO ₄ ⁻³	50,497	0	50,497	0	0	50,497	50,5
SH ₂	12,862	0	17,742	0	0	15,308	15,3
SiH ₄	24,572	0	24,572	0	0	24,572	24,57
SiO ₂	13,896	0	13,896	0	0	36,879	21,56
SO ₂	13,067	0	33,596	0	0	14,477	20,38
SO ₄ ⁻²	34,696	0	34,696	0	0	34,696	34,7

Tabela 155: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores HF/cc-pVDZ

HF/cc-pVDZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	11,932	0	11,932	0	0	11,932	11,93
BH ₄ ⁻	23,899	0	23,899	0	0	23,899	23,9
CO ₃ ⁻²	18,467	0	18,467	0	0	10,59	15,84
HCO ₃ ⁻	21,064	-2,59	19,096	0	0	10,373	16,84
NO ₂ ⁻	6,451	0	21,518	0	0	8,521	12,16
NO ₃ ⁻	20,194	0	20,194	0	0	7,118	15,83
OH ⁻	3,279	0	3,279	0	0	8,426	4,99
AlF ₂ H	14,451	0	17,347	0	0	15,984	15,93
AlF ₃	12,394	0	12,394	0	0	10,198	11,66
AlFH ₂	17,155	0	19,473	0	0	23,297	19,97
AlH ₃	27,239	0	27,239	0	0	18,909	24,46
BF ₃	10,777	0	10,777	0	0	7,139	9,56
BH ₃	16,896	0	16,896	0	0	9,186	14,33
C ₂ H ₄ O ₂	25,445	2,15	29,617	0	0,001	18,636	24,57
C ₃ H ₆ O ₂	37,053	1,645	39,313	0	0,001	27,781	34,72
C ₄ H ₆	58,657	-21,359	58,415	0	0	18,766	45,28
C ₄ H ₈ O ₂	49,932	0,369	48,718	0,001	0	36,9	45,18
C ₅ H ₁₀ O ₂	63,621	1,779	57,917	0,001	0,001	45,767	55,77
C ₆ H ₅ OCH ₃	91,83	0	78,728	-4,52	-0,002	37,135	69,23
C ₆ H ₆	70,244	0	70,244	0	0	24,343	54,94
CF ₄	10,852	0	10,852	0	0	10,852	10,85
CH ₂ F ₂	11,32	0	11,692	0	0	11,47	11,49
CH ₃ F	12,077	0	12,077	0	0	12,062	12,07
CH ₄	12,789	0	12,789	0	0	12,789	12,79
CHF ₃	11,309	0	11,309	0	0	10,772	11,13
CO	7,98	0	7,98	0	0	11,761	9,24
CO ₂	7,049	0	7,049	0	0	19,218	11,11
F ₂	1,499	0	1,499	0	0	10,068	4,36
H ₂	1,162	0	1,162	0	0	6,326	2,88
H ₂ CO ₃	20,306	0	19,085	0	0	9,991	16,46
H ₂ PO ₄ ⁻	23,48	0,01	27,238	-0,002	-1,007	21,963	24,23
H ₂ SO ₄	21,726	-0,004	24,879	0,002	-1,105	20,588	22,4
H ₃ PO ₄	24,831	-0,618	23,893	-1,568	0,518	22,667	23,8
HCl	6,322	0	6,322	0	0	12,676	8,44
HF	1,55	0	1,55	0	0	3,845	2,32
HPO ₄ ⁻²	26,384	0,001	23,351	1,37	0	23,034	24,26
HSO ₄ ⁻	22,866	1,732	22,238	-0,001	0	21,276	22,13
LiH	23,994	0	23,994	0	0	17,542	21,84
NaCl	16,878	0	16,878	0	0	22,189	18,65
NaH	30,245	0	30,245	0	0	34,077	31,52
O ₂	2,527	0	3,371	0	0	11,615	5,84
O ₃	4,544	0	28,092	0	0	6,484	13,04
PH ₃	23,866	0	23,866	0	0	19,205	22,31
PO ₄ ⁻³	23,149	0	23,149	0	0	23,149	23,15
SH ₂	9,511	0	18,052	0	0	15,968	14,51
SiH ₄	25,154	0	25,154	0	0	25,154	25,15
SiO ₂	15,395	0	15,395	0	0	26,841	19,21
SO ₂	11,584	0	24,64	0	0	13,106	16,44
SO ₄ ⁻²	20,964	0	20,964	0	0	20,964	20,96

Tabela 156: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores HF/aug-cc-pVDZ

HF/aug-cc-pVDZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	19,043	0	19,043	0	0	19,043	19,04
BH ₄ ⁻	34,725	0	34,725	0	0	34,725	34,73
CO ₃ ⁻²	39,424	0	39,424	0	0	29,456	36,1
HCO ₃ ⁻	31,367	-1,774	29,321	0	0	20,69	27,13
NO ₂ ⁻	16,436	0	31,365	0	0	21,432	23,08
NO ₃ ⁻	29,925	0	29,925	0	0	17,523	25,79
OH ⁻	15,432	0	15,432	0	0	14,494	15,12
AlF ₂ H	18,969	0	21,047	0	0	20,085	20,03
AlF ₃	16,253	0	16,253	0	0	14,545	15,68
AlFH ₂	22,727	0	23,987	0	0	27,469	24,73
AlH ₃	32,188	0	32,188	0	0	26,374	30,25
BF ₃	14,005	0	14,005	0	0	11,153	13,05
BH ₃	18,037	0	18,037	0	0	13,773	16,62
C ₂ H ₄ O ₂	31,933	1,889	34,759	0	0,001	24,239	30,31
C ₃ H ₆ O ₂	44,994	1,323	45,024	0,001	0,001	33,781	41,27
C ₄ H ₆	62,688	-21,619	65,195	0	0	36,59	54,82
C ₄ H ₈ O ₂	59,497	0,042	55,126	0,001	0	43,283	52,64
C ₅ H ₁₀ O ₂	74,524	1,634	65,233	0,001	0,001	52,626	64,13
C ₆ H ₅ OCH ₃	101,663	0	87,102	-2,514	-0,001	57,026	81,93
C ₆ H ₆	77,248	0	77,248	0	0	44,722	66,41
CF ₄	15,918	0	15,918	0	0	15,918	15,92
CH ₂ F ₂	14,638	0	16,018	0	0	15,303	15,32
CH ₃ F	14,954	0	14,954	0	0	16,01	15,31
CH ₄	15,787	0	15,787	0	0	15,787	15,79
CHF ₃	15,904	0	15,904	0	0	15,048	15,62
CO	10,84	0	10,84	0	0	13,982	11,89
CO ₂	10,988	0	10,988	0	0	22,721	14,9
F ₂	4,759	0	4,759	0	0	11,764	7,09
H ₂	4,359	0	4,359	0	0	6,44	5,05
H ₂ CO ₃	25,282	0	25,131	0	0	16,458	22,29
H ₂ PO ₄ ⁻	35,713	0,007	38,387	-0,001	-0,647	35,051	36,38
H ₂ SO ₄	29,667	-0,002	31,705	0,001	-0,609	28,648	30,01
H ₃ PO ₄	32,5	-0,433	31,86	-1,065	0,398	31,041	31,8
HCl	14,694	0	14,694	0	0	16,933	15,44
HF	3,756	0	3,756	0	0	5,406	4,31
HPO ₄ ⁻²	45,724	0,001	44,497	0,703	0	44,062	44,76
HSO ₄ ⁻	34,126	0,943	33,642	0	0	33,172	33,65
LiH	25,445	0	25,445	0	0	20,777	23,89
NaCl	23,601	0	23,601	0	0	27,195	24,8
NaH	31,974	0	31,974	0	0	39,89	34,61
O ₂	6,832	0	6,795	0	0	13,596	9,07
O ₃	9,982	0	32,336	0	0	11,279	17,87
PH ₃	28,781	0	28,781	0	0	29,544	29,03
PO ₄ ⁻³	60,959	0	60,959	0	0	60,959	60,96
SH ₂	22,635	0	22,767	0	0	22,133	22,51
SiH ₄	29,869	0	29,869	0	0	29,869	29,87
SiO ₂	20,357	0	20,357	0	0	31,172	23,96
SO ₂	17,381	0	29,442	0	0	19,708	22,18
SO ₄ ⁻²	39,758	0	39,758	0	0	39,758	39,76

Tabela 157: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores HF/cc-pVTZ

HF/cc-pVTZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	15,588	0	15,588	0	0	15,588	15,59
BH ₄ ⁻	28,048	0	28,048	0	0	28,048	28,05
CO ₃ ⁻²	24,255	0	24,255	0	0	15,732	21,41
HCO ₃ ⁻	25,218	-2,201	23,38	0	0	14,698	21,1
NO ₂ ⁻	9,506	0	24,537	0	0	11,904	15,32
NO ₃ ⁻	23,609	0	23,609	0	0	11,022	19,41
OH ⁻	6,006	0	6,006	0	0	10,253	7,42
AlF ₂ H	17,363	0	19,597	0	0	18,573	18,51
AlF ₃	14,734	0	14,734	0	0	12,972	14,15
AlFH ₂	20,711	0	22,106	0	0	25,558	22,79
AlH ₃	29,549	0	29,549	0	0	23,66	27,59
BF ₃	12,677	0	12,677	0	0	9,498	11,62
BH ₃	17,524	0	17,524	0	0	11,668	15,57
C ₂ H ₄ O ₂	29,055	2,034	32,435	0	0,001	21,903	27,8
C ₃ H ₆ O ₂	41,768	1,417	42,672	0,001	0,001	31,456	38,63
C ₄ H ₆	60,752	-21,684	61,68	0	0	26,966	49,8
C ₄ H ₈ O ₂	55,843	0,187	52,541	0,001	0	40,915	49,77
C ₅ H ₁₀ O ₂	70,547	1,679	62,349	0,001	0,001	50,145	61,01
C ₆ H ₅ OCH ₃	97,38	0	83,169	-3,441	-0,002	47,305	75,95
C ₆ H ₆	73,602	0	73,602	0	0	34,054	60,42
CF ₄	13,637	0	13,637	0	0	13,637	13,64
CH ₂ F ₂	13,132	0	14,068	0	0	13,625	13,61
CH ₃ F	13,777	0	13,777	0	0	14,169	13,91
CH ₄	14,539	0	14,539	0	0	14,539	14,54
CHF ₃	13,857	0	13,857	0	0	13,04	13,58
CO	9,582	0	9,582	0	0	12,977	10,71
CO ₂	9,156	0	9,156	0	0	21,014	13,11
F ₂	2,818	0	2,818	0	0	10,82	5,49
H ₂	2,6	0	2,6	0	0	6,486	3,9
H ₂ CO ₃	22,952	0	22,414	0	0	13,595	19,65
H ₂ PO ₄ ⁻	28,934	0,008	32,012	-0,002	-0,819	27,851	29,6
H ₂ SO ₄	25,872	-0,003	28,512	0,002	-0,92	24,966	26,45
H ₃ PO ₄	28,985	-0,512	28,221	-1,31	0,456	27,237	28,15
HCl	10,119	0	10,119	0	0	14,648	11,63
HF	2,56	0	2,56	0	0	4,766	3,3
HPO ₄ ⁻²	32,756	0,001	30,304	1,079	0	30,07	31,04
HSO ₄ ⁻	27,77	1,425	27,273	-0,001	0	26,529	27,19
LiH	24,517	0	24,517	0	0	20,111	23,05
NaCl	21,414	0	21,414	0	0	25,468	22,77
NaH	31,631	0	31,631	0	0	37,314	33,53
O ₂	4,198	0	4,687	0	0	12,543	7,14
O ₃	6,591	0	30,165	0	0	8,461	15,07
PH ₃	26,262	0	26,262	0	0	23,918	25,48
PO ₄ ⁻³	31,572	0	31,572	0	0	31,572	31,57
SH ₂	15,082	0	20,265	0	0	19,01	18,12
SiH ₄	27,767	0	27,767	0	0	27,767	27,77
SiO ₂	18,639	0	18,639	0	0	28,258	21,85
SO ₂	14,555	0	26,618	0	0	16,606	19,26
SO ₄ ⁻²	27,299	0	27,299	0	0	27,299	27,3

Tabela 158: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores HF/aug-cc-pVTZ

HF/aug-cc-pVTZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	19,555	0	19,555	0	0	19,555	19,55
BH ₄ ⁻	35,521	0	35,521	0	0	35,521	35,52
CO ₃ ⁻²	42,619	0	42,619	0	0	31,641	38,96
HCO ₃ ⁻	31,994	-1,707	30,232	0	0	21,515	27,91
NO ₂ ⁻	17,587	0	32,295	0	0	22,717	24,2
NO ₃ ⁻	30,878	0	30,878	0	0	18,444	26,73
OH ⁻	17,659	0	17,659	0	0	16,062	17,13
AlF ₂ H	19,637	0	21,701	0	0	20,589	20,64
AlF ₃	17,024	0	17,024	0	0	15,43	16,49
AlFH ₂	23,126	0	24,258	0	0	27,728	25,04
AlH ₃	32,053	0	32,053	0	0	26,355	30,15
BF ₃	14,31	0	14,31	0	0	11,578	13,4
BH ₃	17,959	0	17,959	0	0	13,769	16,56
C ₂ H ₄ O ₂	32,148	1,776	34,846	0	0,001	24,522	30,51
C ₃ H ₆ O ₂	45,203	1,34	45,072	0,001	0,001	34	41,42
C ₄ H ₆	62,854	-21,311	65,582	0	0	36,621	55,02
C ₄ H ₈ O ₂	59,669	0,083	55,173	0,001	0	43,505	52,78
C ₅ H ₁₀ O ₂	74,699	1,665	65,266	0,001	0,001	52,857	64,27
C ₆ H ₅ OCH ₃	101,803	0	87,356	-2,556	-0,001	57,043	82,07
C ₆ H ₆	77,617	0	77,617	0	0	44,73	66,65
CF ₄	16,365	0	16,365	0	0	16,365	16,36
CH ₂ F ₂	15,049	0	16,271	0	0	15,608	15,64
CH ₃ F	15,216	0	15,216	0	0	16,142	15,52
CH ₄	15,847	0	15,847	0	0	15,847	15,85
CHF ₃	16,277	0	16,277	0	0	15,476	16,01
CO	11,097	0	11,097	0	0	14,043	12,08
CO ₂	11,516	0	11,516	0	0	22,71	15,25
F ₂	5,27	0	5,27	0	0	12,122	7,55
H ₂	4,586	0	4,586	0	0	6,356	5,18
H ₂ CO ₃	25,658	0	25,32	0	0	16,861	22,61
H ₂ PO ₄ ⁻	36,367	0,006	38,634	-0,001	-0,529	35,524	36,84
H ₂ SO ₄	29,899	-0,002	31,746	0,001	-0,561	28,852	30,17
H ₃ PO ₄	32,681	-0,374	32,105	-0,941	0,345	31,173	31,99
HCl	15,787	0	15,787	0	0	17,614	16,4
HF	4,233	0	4,233	0	0	5,53	4,67
HPO ₄ ⁻²	47,129	0,001	45,882	0,71	0	45,351	46,12
HSO ₄ ⁻	34,643	0,913	34,09	0	0	33,663	34,13
LiH	25,294	0	25,294	0	0	21,861	24,15
NaCl	25,473	0	25,473	0	0	28,278	26,41
NaH	32,394	0	32,394	0	0	39,748	34,85
O ₂	7,33	0	7,271	0	0	14,008	9,54
O ₃	10,532	0	32,865	0	0	11,799	18,4
PH ₃	29,132	0	29,132	0	0	30,197	29,49
PO ₄ ⁻³	66,671	0	66,671	0	0	66,671	66,67
SH ₂	23,725	0	23,583	0	0	23,101	23,47
SiH ₄	29,682	0	29,682	0	0	29,682	29,68
SiO ₂	21,619	0	21,619	0	0	31,161	24,8
SO ₂	18,07	0	29,276	0	0	20,12	22,49
SO ₄ ⁻²	41,157	0	41,157	0	0	41,157	41,16

Tabela 159: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores HF/pc-3

Molécula	HF/pc3						Polarizabilidade
	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	
BF ₄ ⁻	19,144	0	19,144	0	0	19,144	19,14
BH ₄ ⁻	33,044	0	33,044	0	0	33,044	33,04
CO ₃ ⁻²	37,441	0	37,441	0	0	27,776	34,22
HCO ₃ ⁻	31,225	-1,714	29,192	0	0	20,473	26,96
NO ₂ ⁻	15,488	0	30,944	0	0	19,757	22,06
NO ₃ ⁻	29,76	0	29,76	0	0	17,295	25,6
OH ⁻	14,142	0	14,142	0	0	13,496	13,93
AlF ₂ H	18,781	0	21,416	0	0	20,18	20,13
AlF ₃	16,734	0	16,734	0	0	14,832	16,1
AlFH ₂	21,375	0	23,813	0	0	27,448	24,21
AlH ₃	31,717	0	31,717	0	0	23,335	28,92
BF ₃	14,156	0	14,156	0	0	11,365	13,23
BH ₃	17,878	0	17,878	0	0	13,036	16,26
C ₂ H ₄ O ₂	31,841	1,86	34,641	0	0,001	24,232	30,24
C ₃ H ₆ O ₂	44,911	1,302	44,923	0,001	0,001	33,778	41,2
C ₄ H ₆	62,624	-21,859	64,793	0	0	35,915	54,44
C ₄ H ₈ O ₂	59,407	0,038	55,015	0,001	0	43,306	52,58
C ₅ H ₁₀ O ₂	74,433	1,621	65,118	0,001	0,001	52,667	64,07
C ₆ H ₅ OCH ₃	101,41	0	87,045	-2,589	-0,001	56,692	81,72
C ₆ H ₆	77,038	0	77,038	0	0	44,263	66,11
CF ₄	16,123	0	16,123	0	0	16,123	16,12
CH ₂ F ₂	14,776	0	16,07	0	0	15,382	15,41
CH ₃ F	15,003	0	15,003	0	0	15,878	15,29
CH ₄	15,615	0	15,615	0	0	15,615	15,61
CHF ₃	16,061	0	16,061	0	0	15,201	15,77
CO	10,817	0	10,817	0	0	13,981	11,87
CO ₂	11,085	0	11,085	0	0	22,689	14,95
F ₂	4,89	0	4,89	0	0	11,984	7,25
H ₂	4,118	0	4,118	0	0	6,368	4,87
H ₂ CO ₃	25,233	0	25,19	0	0	16,497	22,31
H ₂ PO ₄ ⁻	35,049	0,007	37,657	-0,001	-0,724	34,338	35,68
H ₂ SO ₄	29,322	-0,002	31,382	0,001	-0,686	28,436	29,71
H ₃ PO ₄	32,2	-0,428	31,521	-1,093	0,396	30,78	31,5
HCl	13,11	0	13,11	0	0	16,324	14,18
HF	3,967	0	3,967	0	0	5,431	4,45
HPO ₄ ⁻²	43,631	0,001	41,926	0,565	0	41,687	42,41
HSO ₄ ⁻	33,567	0,983	33,143	-0,001	0	32,627	33,11
LiH	22,683	0	22,683	0	0	21,734	22,37
NaCl	20,376	0	20,376	0	0	27,393	22,72
NaH	28,32	0	28,32	0	0	38,778	31,81
O ₂	6,711	0	6,824	0	0	13,788	9,11
O ₃	9,914	0	32,67	0	0	11,285	17,96
PH ₃	28,013	0	28,013	0	0	27,866	27,96
PO ₄ ⁻³	52,287	0	52,287	0	0	52,287	52,29
SH ₂	21,495	0	21,736	0	0	21,051	21,43
SiH ₄	28,731	0	28,731	0	0	28,731	28,73
SiO ₂	20,135	0	20,135	0	0	31,075	23,78
SO ₂	17,172	0	28,64	0	0	19,241	21,68
SO ₄ ⁻²	38,069	0	38,069	0	0	38,069	38,07

Tabela 160: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores HF/aug-pc-3

HF/aug-pc3							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	19,767	0	19,767	0	0	19,767	19,77
BH ₄ ⁻	35,733	0	35,733	0	0	35,733	35,73
CO ₃ ⁻²	47,526	0	47,526	0	0	36,003	43,69
HCO ₃ ⁻	32,393	-1,682	30,656	0	0	22,061	28,37
NO ₂ ⁻	18,887	0	33,2	0	0	23,986	25,36
NO ₃ ⁻	31,492	0	31,492	0	0	19,045	27,34
OH ⁻	22,604	0	22,604	0	0	17,724	20,98
AlF ₂ H	19,756	0	21,853	0	0	20,722	20,78
AlF ₃	17,204	0	17,204	0	0	15,619	16,68
AlFH ₂	23,143	0	24,344	0	0	27,829	25,11
AlH ₃	32,068	0	32,068	0	0	26,255	30,13
BF ₃	14,337	0	14,337	0	0	11,7	13,46
BH ₃	17,953	0	17,953	0	0	13,758	16,55
C ₂ H ₄ O ₂	32,181	1,75	34,842	0	0,001	24,608	30,54
C ₃ H ₆ O ₂	45,208	1,338	45,056	0,001	0,001	34,05	41,44
C ₄ H ₆	62,887	-21,196	65,663	0	0	36,628	55,06
C ₄ H ₈ O ₂	77,666	0	77,666	0	0	44,666	66,67
C ₅ H ₁₀ O ₂	16,449	0	16,449	0	0	16,449	16,45
C ₆ H ₅ OCH ₃	15,147	0	16,31	0	0	15,666	15,71
C ₆ H ₆	15,281	0	15,281	0	0	16,143	15,57
CF ₄	15,846	0	15,846	0	0	15,846	15,85
CH ₂ F ₂	16,347	0	16,347	0	0	15,571	16,09
CH ₃ F	11,132	0	11,132	0	0	14,015	12,09
CH ₄	11,655	0	11,655	0	0	22,702	15,34
CHF ₃	5,428	0	5,428	0	0	12,276	7,71
CO	4,557	0	4,557	0	0	6,36	5,16
CO ₂	25,729	0	25,367	0	0	16,976	22,69
F ₂	36,653	0,006	38,799	-0,001	-0,476	35,692	37,05
H ₂	29,92	-0,002	31,762	0,001	-0,565	28,87	30,18
H ₂ CO ₃	32,708	-0,367	32,159	-0,918	0,338	31,198	32,02
H ₂ PO ₄ ⁻	16,15	0	16,15	0	0	17,84	16,71
H ₂ SO ₄	4,445	0	4,445	0	0	5,57	4,82
H ₃ PO ₄	48,584	0,001	47,263	0,584	0	46,721	47,52
HCl	34,895	0,913	34,347	0	0	33,91	34,38
HF	25,264	0	25,264	0	0	21,842	24,12
HPO ₄ ⁻²	26,135	0	26,135	0	0	29,049	27,11
HSO ₄ ⁻	32,145	0	32,145	0	0	39,273	34,52
LiH	7,488	0	7,421	0	0	14,163	9,69
NaCl	10,73	0	33,018	0	0	11,975	18,57
NaH	29,142	0	29,142	0	0	30,285	29,52
O ₂	105,663	0	105,663	0	0	105,663	105,66
O ₃	24,042	0	23,81	0	0	23,35	23,73
PH ₃	29,575	0	29,575	0	0	29,575	29,58
PO ₄ ⁻³	21,821	0	21,821	0	0	31,047	24,9
SH ₂	18,33	0	29,067	0	0	20,232	22,54
SiH ₄	42,716	0	42,716	0	0	42,716	42,72
SiO ₂	20,135	0	20,135	0	0	31,075	23,78
SO ₂	17,172	0	28,64	0	0	19,241	21,68
SO ₄ ⁻²	38,069	0	38,069	0	0	38,069	38,07

Tabela 161: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores MP2/MCG

MP2/MCG							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF_4^-	19,952	0	19,952	0	0	19,952	19,952
BH_4^-	30,86	0	30,86	0	0	30,86	30,860
CO_3^{2-}	38,036	0	38,036	0	0	23,038	33,037
HCO_3^-	34,94	-2,478	32,601	0	0	19,719	29,087
NO_2^-	13,189	0	35,757	0	0	19,654	22,867
NO_3^-	34,433	0	34,433	0	0	14,995	27,954
OH^-	11,623	0	11,623	0	0	13,613	12,286
AlF_2H	20,361	0,001	23,676	0	0	22,906	22,314
AlF_3	19,81	0	19,81	0	0	16,937	18,852
AlFH_2	22,907	0	25,785	0	0	28,336	25,676
AlH_3	31,814	0	31,814	0	0	25,164	29,597
BF_3	15,703	0	15,703	0	0	11,318	14,241
BH_3	17,807	0	17,807	0	0	11,377	15,664
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	34,098	2,076	37,977	0	0	24,54	32,205
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	48,117	1,949	48,36	0,001	0,001	34,473	43,650
C_4H_6	58,67	-18,604	62,554	0	0	32,198	51,141
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	63,154	-0,99	59,163	0	0	44,361	55,559
C_6H_6	77,543	0	77,543	0	0	40,377	65,154
CF_4	16,588	0	16,588	0	0	16,588	16,588
CH_2F_2	14,347	0	16,863	0	0	15,601	15,604
CH_3F	14,712	0	14,712	0	0	16,138	15,187
CH_4	15,236	0	15,236	0	0	15,236	15,236
CHF_3	16,744	0	16,744	0	0	15,082	16,190
CO	10,306	0	10,306	0	0	15,583	12,065
CO_2	10,254	0	10,254	0	0	27,622	16,043
F_2	3,487	0	3,487	0	0	9,976	5,650
H_2	2,808	0	2,808	0	0	6,397	4,004
H_2CO_3	27,104	-1,6	29,999	0	0	16,88	24,661
H_2PO_4^-	40,208	0,008	43,951	-0,001	-0,451	39,093	41,084
H_2SO_4	33,129	-0,006	36,557	0,001	-0,649	32,274	33,987
H_3PO_4	37,525	0,31	35,732	-1,382	0,114	36,032	36,430
HCl	13,452	0	13,452	0	0	16,029	14,311
HF	3,197	0	3,197	0	0	5,587	3,994
HPO_4^{2-}	49,71	0,001	46,84	0,604	-0,001	45,469	47,340
HSO_4^-	37,327	1,427	37,473	0,001	0	36,933	37,244
LiH	4	0	4	0	0	28	12,000
NaCl	18,94	0	18,94	0	0	27,993	21,958
NaH	8,866	0	8,866	0	0	46,806	21,513
O_2	6,356	0	5,6	0	0	10,506	7,487
O_3	9,09	0	19,169	0	0	11,872	13,377
PH_3	28,092	0	28,092	0	0	28,431	28,205
PO_4^{3-}	53,031	0	53,031	0	0	53,031	53,031
SH_2	19,673	0	21,13	0	0	20,776	20,526
SiH_4	29,528	0	29,528	0	0	29,528	29,528
SiO_2	24,951	0	24,951	0	0	42,591	30,831
SO_2	17,092	0	33,695	0	0	21,288	24,025
SO_4^{2-}	40,578	0	40,578	0	0	40,578	40,578

Tabela 162: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores MP2/aMCG-2d1f

MP2/aMCG-2d1f							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	21,74	0,00	21,74	0,00	0,00	21,74	21,74
BH ₄ ⁻	31,52	0,00	31,52	0,00	0,00	31,52	31,52
HCO ₃ ⁻	39,21	-2,19	35,83	0,00	0,00	22,97	32,67
NO ₂ ⁻	18,77	0,00	42,41	0,00	0,00	27,95	29,71
NO ₃ ⁻	38,54	0,00	38,54	0,00	0,00	19,04	32,04
OH ⁻	25,88	0,00	25,88	0,00	0,00	13,33	21,69
AlF ₂ H	18,58	0,00	23,10	0,00	0,00	22,45	21,37
AlF ₃	19,47	0,00	19,47	0,00	0,00	16,09	18,34
AlFH ₂	18,76	0,00	24,98	0,00	0,00	27,76	23,84
AlH ₃	31,03	0,00	31,03	0,00	0,00	18,34	26,80
BF ₃	15,97	0,00	15,97	0,00	0,00	11,70	14,55
BH ₃	17,69	0,00	17,69	0,00	0,00	9,36	14,92
C ₂ H ₄ O ₂	34,19	2,13	38,50	0,00	0,00	24,92	32,54
C ₃ H ₆ O ₂	48,06	1,96	48,76	0,00	0,00	34,77	43,86
C ₄ H ₆	58,34	-18,87	61,60	0,00	0,00	33,51	51,15
C ₄ H ₈ O ₂	62,96	-0,80	59,54	0,00	0,00	44,66	55,72
C ₆ H ₆	77,04	0,00	77,04	0,00	0,00	42,06	65,38
CF ₄	18,06	0,00	18,06	0,00	0,00	18,06	18,06
CH ₂ F ₂	15,09	0,00	17,28	0,00	0,00	16,06	16,14
CH ₃ F	14,93	0,00	14,93	0,00	0,00	15,95	15,27
CH ₄	14,63	0,00	14,63	0,00	0,00	14,63	14,63
CHF ₃	17,74	0,00	17,74	0,00	0,00	16,21	17,23
CO	10,46	0,00	10,46	0,00	0,00	15,93	12,28
CO ₂	10,51	0,00	10,51	0,00	0,00	28,23	16,42
F ₂	4,93	0,00	4,93	0,00	0,00	10,65	6,84
H ₂	2,06	0,00	2,06	0,00	0,00	6,43	3,52
H ₂ PO ₄ ⁻	41,67	0,01	46,17	0,00	-0,64	41,58	43,14
H ₂ SO ₄	33,49	-0,01	37,07	0,00	-0,67	32,93	34,50
H ₃ PO ₄	37,60	0,35	35,79	-1,57	0,02	36,25	36,55
HCl	10,96	0,00	10,96	0,00	0,00	14,18	12,03
HF	3,76	0,00	3,76	0,00	0,00	5,51	4,35
HPO ₄ ⁻²	60,97	0,00	60,44	1,15	0,00	58,37	59,93
HSO ₄ ⁻	39,89	1,24	40,35	0,00	0,00	40,01	40,08
LiH	2,64	0,00	2,64	0,00	0,00	32,18	12,49
NaCl	18,99	0,00	18,99	0,00	0,00	30,61	22,87
NaH	21,53	0,00	21,53	0,00	0,00	46,52	29,86
O ₂	7,19	0,00	6,27	0,00	0,00	11,10	8,19
O ₃	10,20	0,00	20,15	0,00	0,00	12,94	14,43
PH ₃	25,08	0,00	25,08	0,00	0,00	24,55	24,90
SH ₂	18,93	0,00	18,12	0,00	0,00	17,42	18,15
SiH ₄	28,85	0,00	28,85	0,00	0,00	28,85	28,85
SiO ₂	24,02	0,00	24,02	0,00	0,00	43,77	30,60
SO ₂	17,01	0,00	35,41	0,00	0,00	21,10	24,51
SO ₄ ⁻²	52,27	0,00	52,27	0,00	0,00	52,27	52,27

Tabela 163: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores MP2/aMCG-3d2f1g

MP2/aMCG-3d2f1g							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	23,40	0,00	23,40	0,00	0,00	23,40	23,40
BH ₄ ⁻	35,27	0,00	35,27	0,00	0,00	35,27	35,27
CO ₃ ⁻²	68,32	0,00	68,32	0,00	0,00	46,27	60,97
HCO ₃ ⁻	40,32	-1,92	38,39	0,00	0,00	25,38	34,70
NO ₂ ⁻	20,90	0,00	43,37	0,00	0,00	29,75	31,34
NO ₃ ⁻	40,17	0,00	40,17	0,00	0,00	21,52	33,95
OH ⁻	30,10	0,00	30,10	0,00	0,00	17,28	25,83
AlF ₂ H	20,92	0,00	24,35	0,00	0,00	23,55	22,94
AlF ₃	20,68	0,00	20,68	0,00	0,00	18,08	19,81
AlFH ₂	22,47	0,00	26,34	0,00	0,00	28,91	25,91
AlH ₃	32,40	0,00	32,40	0,00	0,00	23,46	29,42
BF ₃	17,04	0,00	17,04	0,00	0,00	13,35	15,81
BH ₃	18,14	0,00	18,14	0,00	0,00	13,34	16,54
C ₂ H ₄ O ₂	36,07	1,71	39,23	0,00	0,00	26,32	33,87
C ₄ H ₆	59,72	-18,25	64,61	0,00	0,00	36,21	53,52
CF ₄	19,08	0,00	19,08	0,00	0,00	19,08	19,08
CH ₂ F ₂	16,24	0,00	18,53	0,00	0,00	17,25	17,34
CH ₃ F	15,98	0,00	15,98	0,00	0,00	17,59	16,52
CH ₄	16,14	0,00	16,14	0,00	0,00	16,14	16,14
CHF ₃	18,81	0,00	18,81	0,00	0,00	17,34	18,32
CO	11,69	0,00	11,69	0,00	0,00	15,81	13,06
CO ₂	12,67	0,00	12,67	0,00	0,00	28,01	17,79
F ₂	6,18	0,00	6,18	0,00	0,00	11,30	7,88
H ₂	4,19	0,00	4,19	0,00	0,00	6,39	4,92
H ₂ CO ₃	29,12	-1,45	31,52	0,00	0,00	19,10	26,58
H ₂ PO ₄ ⁻	44,50	0,01	47,77	0,00	-0,32	43,61	45,29
H ₂ SO ₄	35,41	-0,01	38,16	0,00	-0,42	34,32	35,96
H ₃ PO ₄	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
HCl	15,01	0,00	15,01	0,00	0,00	17,16	15,73
HF	4,93	0,00	4,93	0,00	0,00	6,28	5,38
HPO ₄ ⁻²	64,66	0,00	63,23	0,67	0,00	61,61	63,17
HSO ₄ ⁻	42,29	1,00	42,10	0,00	0,00	41,67	42,02
LiH	11,58	0,00	11,58	0,00	0,00	25,87	16,34
NaCl	23,58	0,00	23,58	0,00	0,00	30,89	26,02
NaH	23,81	0,00	23,81	0,00	0,00	45,48	31,03
O ₂	7,65	0,00	8,57	0,00	0,00	11,86	9,36
O ₃	11,59	0,00	20,91	0,00	0,00	14,10	15,54
PH ₃	28,21	0,00	28,21	0,00	0,00	29,00	28,47
PO ₄ ⁻³	146,60	0,00	146,60	0,00	0,00	146,60	146,60
SH ₂	22,34	0,00	21,39	0,00	0,00	21,42	21,72
SiH ₄	29,50	0,00	29,50	0,00	0,00	29,50	29,50
SiO ₂	25,09	0,00	25,09	0,00	0,00	43,61	31,26
SO ₂	19,19	0,00	34,98	0,00	0,00	22,97	25,71
SO ₄ ⁻²	52,45	0,00	52,45	0,00	0,00	52,45	52,45

Tabela 164: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores MP2/6-311G

MP2/6-311G							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF_4^-	12,29	0,00	12,29	0,00	0,00	12,29	12,29
BH_4^-	25,21	0,00	25,21	0,00	0,00	25,21	25,21
CO_3^{2-}	23,19	0,00	23,19	0,00	0,00	10,88	19,08
HCO_3^-	26,98	-3,85	23,36	0,00	0,00	10,54	20,29
NO_2^-	6,52	0,00	27,37	0,00	0,00	9,28	14,39
NO_3^-	26,49	0,00	26,49	0,00	0,00	6,96	19,98
OH^-	3,50	0,00	3,50	0,00	0,00	9,63	5,54
AlF_2H	11,96	0,00	19,81	0,00	0,00	17,97	16,58
AlF_3	14,67	0,00	14,67	0,00	0,00	8,68	12,67
AlFH_2	13,15	0,00	21,82	0,00	0,00	26,83	20,60
AlH_3	31,19	0,00	31,19	0,00	0,00	12,82	25,07
BF_3	12,36	0,00	12,36	0,00	0,00	6,50	10,41
BH_3	17,40	0,00	17,40	0,00	0,00	6,94	13,91
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	26,79	2,63	33,48	0,00	0,00	18,94	26,40
$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$	38,60	2,39	42,93	0,00	0,00	28,50	36,67
C_4H_6	53,29	-16,15	54,99	0,00	0,00	18,93	42,40
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	52,16	1,34	51,96	0,00	0,00	37,96	47,36
C_6H_6	70,71	0,00	70,71	0,00	0,00	24,83	55,42
CF_4	11,77	0,00	11,77	0,00	0,00	11,77	11,77
CH_2F_2	10,99	0,00	12,48	0,00	0,00	11,66	11,71
CH_3F	11,80	0,00	11,80	0,00	0,00	12,27	11,96
CH_4	12,48	0,00	12,48	0,00	0,00	12,48	12,48
CHF_3	12,18	0,00	12,18	0,00	0,00	10,85	11,74
CO	8,45	0,00	8,45	0,00	0,00	14,18	10,36
CO_2	6,76	0,00	6,76	0,00	0,00	26,29	13,27
F_2	0,97	0,00	0,97	0,00	0,00	8,74	3,56
H_2	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	6,51	2,17
H_2CO_3	21,86	-2,17	25,22	0,00	0,00	9,90	18,99
H_2PO_4^-	28,39	0,02	35,78	0,00	-0,95	26,61	30,26
H_2SO_4	26,87	-0,01	33,22	0,00	-0,86	25,74	28,61
H_3PO_4	30,68	0,64	27,46	-2,81	-0,14	28,01	28,71
HCl	3,78	0,00	3,78	0,00	0,00	12,43	6,66
HF	1,05	0,00	1,05	0,00	0,00	4,36	2,15
HPO_4^{2-}	34,55	0,00	30,09	1,66	0,00	28,56	31,07
HSO_4^-	29,90	2,36	29,00	0,00	0,00	27,33	28,74
LiH	24,38	0,00	24,38	0,00	0,00	23,47	24,07
NaCl	14,21	0,00	14,21	0,00	0,00	28,76	19,06
NaH	33,21	0,00	33,21	0,00	0,00	45,90	37,44
O_2	3,40	0,00	1,87	0,00	0,00	8,14	4,47
O_3	4,58	0,00	15,84	0,00	0,00	6,68	9,04
PH_3	23,20	0,00	23,20	0,00	0,00	20,13	22,17
PO_4^{3-}	29,66	0,00	29,66	0,00	0,00	29,66	29,66
SH_2	8,38	0,00	16,92	0,00	0,00	15,84	13,71
SiH_4	24,41	0,00	24,41	0,00	0,00	24,41	24,41
SiO_2	16,37	0,00	16,37	0,00	0,00	44,42	25,72
SO_2	11,41	0,00	31,59	0,00	0,00	14,56	19,19
SO_4^{2-}	26,61	0,00	26,61	0,00	0,00	26,61	26,61

Tabela 165: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores MP2/6-311G+

MP2/6-311G+							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	18,02	0,00	18,02	0,00	0,00	18,02	18,02
BH ₄ ⁻	28,31	0,00	28,31	0,00	0,00	28,31	28,31
CO ₃ ⁻²	49,13	0,00	49,13	0,00	0,00	28,53	42,26
HCO ₃ ⁻	38,03	-3,03	32,74	0,00	0,00	18,92	29,90
NO ₂ ⁻	15,22	0,00	39,56	0,00	0,00	21,96	25,58
NO ₃ ⁻	36,87	0,00	36,87	0,00	0,00	15,06	29,60
OH ⁻	11,54	0,00	11,54	0,00	0,00	11,46	11,51
AlF ₂ H	14,75	0,00	21,84	0,00	0,00	21,60	19,39
AlF ₃	17,55	0,00	17,55	0,00	0,00	11,55	15,55
AlFH ₂	14,33	0,00	24,35	0,00	0,00	28,18	22,28
AlH ₃	32,51	0,00	32,51	0,00	0,00	12,86	25,96
BF ₃	14,54	0,00	14,54	0,00	0,00	8,63	12,57
BH ₃	17,58	0,00	17,58	0,00	0,00	6,93	14,03
C ₂ H ₄ O ₂	30,91	2,73	37,86	0,00	0,00	22,27	30,35
C ₃ H ₆ O ₂	43,58	2,26	47,45	0,00	0,00	31,93	40,99
C ₄ H ₆	56,10	-17,84	58,05	0,00	0,00	30,68	48,28
C ₄ H ₈ O ₂	57,55	0,81	57,16	0,00	0,00	41,64	52,12
C ₆ H ₆	74,57	0,00	74,57	0,00	0,00	39,53	62,89
CF ₄	15,20	0,00	15,20	0,00	0,00	15,20	15,20
CH ₂ F ₂	12,61	0,00	14,95	0,00	0,00	13,66	13,74
CH ₃ F	12,88	0,00	12,88	0,00	0,00	13,87	13,21
CH ₄	12,95	0,00	12,95	0,00	0,00	12,95	12,95
CHF ₃	15,15	0,00	15,15	0,00	0,00	13,44	14,58
CO	9,65	0,00	9,65	0,00	0,00	16,58	11,96
CO ₂	7,90	0,00	7,90	0,00	0,00	30,42	15,41
F ₂	2,61	0,00	2,61	0,00	0,00	9,97	5,06
H ₂	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	6,51	2,17
H ₂ CO ₃	25,52	-2,14	30,09	0,00	0,00	14,19	23,27
H ₂ PO ₄ ⁻	37,39	0,02	45,32	0,00	-1,01	38,00	40,24
H ₂ SO ₄	31,58	-0,01	37,81	0,00	-0,90	31,70	33,70
H ₃ PO ₄	35,93	0,71	33,20	-2,80	-0,32	34,38	34,50
HCl	6,06	0,00	6,06	0,00	0,00	12,66	8,26
HF	1,98	0,00	1,98	0,00	0,00	4,82	2,92
HPO ₄ ⁻²	52,54	0,00	53,14	2,33	0,00	49,67	51,78
HSO ₄ ⁻	38,17	1,88	39,07	0,00	0,00	38,26	38,50
LiH	24,44	0,00	24,44	0,00	0,00	23,59	24,16
NaCl	15,37	0,00	15,37	0,00	0,00	30,64	20,46
NaH	33,35	0,00	33,35	0,00	0,00	46,31	37,67
O ₂	4,41	0,00	4,44	0,00	0,00	9,63	6,16
O ₃	7,88	0,00	18,94	0,00	0,00	10,31	12,38
PH ₃	23,46	0,00	23,46	0,00	0,00	21,59	22,83
PO ₄ ⁻³	78,00	0,00	78,00	0,00	0,00	78,00	78,00
SH ₂	14,70	0,00	17,11	0,00	0,00	15,90	15,90
SiH ₄	24,99	0,00	24,99	0,00	0,00	24,98	24,98
SiO ₂	18,23	0,00	18,23	0,00	0,00	51,63	29,36
SO ₂	14,19	0,00	36,31	0,00	0,00	18,28	22,93
SO ₄ ⁻²	46,33	0,00	46,33	0,00	0,00	46,33	46,33

Tabela 166: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores MP2/cc-pVDZ

MP2/cc-pVDZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	13,46	0,00	13,46	0,00	0,00	13,46	13,46
BH ₄ ⁻	23,63	0,00	23,63	0,00	0,00	23,63	23,63
CO ₃ ²⁻	21,68	0,00	21,68	0,00	0,00	11,02	18,13
HCO ₃ ⁻	24,65	-3,13	22,61	0,00	0,00	10,85	19,37
NO ₂ ⁻	6,54	0,00	25,19	0,00	0,00	9,27	13,67
NO ₃ ⁻	24,31	0,00	24,31	0,00	0,00	7,27	18,63
OH ⁻	3,43	0,00	3,43	0,00	0,00	8,90	5,25
AlF ₂ H	16,04	0,00	19,64	0,00	0,00	18,56	18,08
AlF ₃	15,54	0,00	15,54	0,00	0,00	12,43	14,50
AlFH ₂	18,17	0,00	21,39	0,00	0,00	24,29	21,28
AlH ₃	27,63	0,00	27,63	0,00	0,00	19,34	24,87
BF ₃	12,57	0,00	12,57	0,00	0,00	7,97	11,04
BH ₃	16,89	0,00	16,89	0,00	0,00	9,23	14,34
C ₂ H ₄ O ₂	27,67	2,09	32,22	0,00	0,00	19,04	26,31
C ₃ H ₆ O ₂	39,90	2,16	41,78	0,00	0,00	28,33	36,67
C ₄ H ₆	54,09	-16,85	57,19	0,00	0,00	18,39	43,23
C ₄ H ₈ O ₂	53,53	0,16	51,11	0,00	0,00	37,57	47,40
C ₆ H ₆	71,77	0,00	71,77	0,00	0,00	23,86	55,80
CF ₄	12,09	0,00	12,09	0,00	0,00	12,09	12,09
CH ₂ F ₂	11,78	0,00	12,87	0,00	0,00	12,23	12,30
CH ₃ F	12,31	0,00	12,31	0,00	0,00	12,85	12,49
CH ₄	12,76	0,00	12,76	0,00	0,00	12,76	12,76
CHF ₃	12,53	0,00	12,53	0,00	0,00	11,58	12,21
CO	8,26	0,00	8,26	0,00	0,00	12,92	9,81
CO ₂	7,61	0,00	7,61	0,00	0,00	23,06	12,76
F ₂	1,47	0,00	1,47	0,00	0,00	8,39	3,78
H ₂	1,15	0,00	1,15	0,00	0,00	6,29	2,86
H ₂ CO ₃	21,71	-1,82	23,91	0,00	0,00	10,46	18,69
H ₂ PO ₄ ⁻	27,05	0,01	32,12	0,00	-0,73	24,98	28,05
H ₂ SO ₄	24,77	-0,01	29,43	0,00	-0,88	23,37	25,86
H ₃ PO ₄	29,04	0,35	26,57	-1,80	0,30	26,44	27,35
HCl	6,23	0,00	6,23	0,00	0,00	12,67	8,38
HF	1,60	0,00	1,60	0,00	0,00	4,18	2,46
HPO ₄ ²⁻	31,14	0,00	27,05	1,33	0,00	26,33	28,17
HSO ₄ ⁻	26,12	2,14	25,99	0,00	0,00	24,58	25,56
LiH	26,52	0,00	26,52	0,00	0,00	19,34	24,12
NaCl	19,33	0,00	19,33	0,00	0,00	27,00	21,89
NaH	35,28	0,00	35,28	0,00	0,00	41,39	37,32
O ₂	2,49	0,00	3,54	0,00	0,00	8,52	4,85
O ₃	4,80	0,00	15,44	0,00	0,00	7,10	9,11
PH ₃	23,37	0,00	23,37	0,00	0,00	20,04	22,26
PO ₄ ³⁻	26,47	0,00	26,47	0,00	0,00	26,47	26,47
SH ₂	9,35	0,00	17,29	0,00	0,00	16,21	14,28
SiH ₄	25,45	0,00	25,45	0,00	0,00	25,45	25,45
SiO ₂	18,33	0,00	18,33	0,00	0,00	36,58	24,41
SO ₂	11,59	0,00	28,08	0,00	0,00	14,72	18,13
SO ₄ ²⁻	23,87	0,00	23,87	0,00	0,00	23,87	23,87

Tabela 167: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores MP2/aug-cc-pVDZ

MP2/aug-cc-pVDZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	22,96	0,00	22,96	0,00	0,00	22,96	22,96
BH ₄ ⁻	36,93	0,00	36,93	0,00	0,00	36,93	36,93
CO ₃ ⁻²	55,55	0,00	55,55	0,00	0,00	37,79	49,63
HCO ₃ ⁻	39,39	-1,98	37,57	0,00	0,00	24,52	33,83
NO ₂ ⁻	19,35	0,00	41,26	0,00	0,00	27,57	29,39
NO ₃ ⁻	38,58	0,00	38,58	0,00	0,00	20,35	32,50
OH ⁻	23,10	0,00	23,10	0,00	0,00	18,00	21,40
AlF ₂ H	20,99	0,00	24,06	0,00	0,00	23,32	22,79
AlF ₃	20,14	0,00	20,14	0,00	0,00	17,51	19,27
AlFH ₂	23,92	0,00	26,46	0,00	0,00	29,08	26,49
AlH ₃	33,10	0,00	33,10	0,00	0,00	26,89	31,03
BF ₃	16,76	0,00	16,76	0,00	0,00	12,85	15,46
BH ₃	18,32	0,00	18,32	0,00	0,00	14,00	16,88
C ₂ H ₄ O ₂	36,03	1,83	39,30	0,00	0,00	26,16	33,83
C ₃ H ₆ O ₂	50,19	1,87	49,62	0,00	0,00	36,05	45,29
C ₄ H ₆	60,15	-18,14	65,38	0,00	0,00	37,08	54,21
C ₄ H ₈ O ₂	65,25	-1,30	60,67	0,00	0,00	45,91	57,28
C ₆ H ₆	80,12	0,00	80,12	0,00	0,00	44,96	68,40
CF ₄	18,45	0,00	18,45	0,00	0,00	18,45	18,45
CH ₂ F ₂	15,85	0,00	18,27	0,00	0,00	16,99	17,04
CH ₃ F	15,81	0,00	15,81	0,00	0,00	17,64	16,42
CH ₄	16,32	0,00	16,32	0,00	0,00	16,32	16,32
CHF ₃	18,33	0,00	18,33	0,00	0,00	16,87	17,84
CO	11,72	0,00	11,72	0,00	0,00	15,85	13,10
CO ₂	12,29	0,00	12,29	0,00	0,00	27,94	17,51
F ₂	5,42	0,00	5,42	0,00	0,00	10,83	7,22
H ₂	4,33	0,00	4,33	0,00	0,00	6,49	5,05
H ₂ CO ₃	28,87	-1,50	31,38	0,00	0,00	18,74	26,33
H ₂ PO ₄ ⁻	44,20	0,01	47,95	0,00	-0,47	43,45	45,20
H ₂ SO ₄	35,23	-0,01	38,34	0,00	-0,47	34,18	35,91
H ₃ PO ₄	39,12	0,27	37,31	-1,40	0,11	37,62	38,01
HCl	15,15	0,00	15,15	0,00	0,00	17,40	15,90
HF	4,33	0,00	4,33	0,00	0,00	6,25	4,97
HPO ₄ ⁻²	61,51	0,00	59,40	0,37	0,00	58,39	59,77
HSO ₄ ⁻	41,85	1,04	41,72	0,00	0,00	41,22	41,60
LiH	27,33	0,00	27,33	0,00	0,00	22,75	25,80
NaCl	26,05	0,00	26,05	0,00	0,00	31,22	27,78
NaH	35,55	0,00	35,55	0,00	0,00	47,08	39,39
O ₂	7,90	0,00	7,06	0,00	0,00	11,56	8,84
O ₃	10,83	0,00	20,98	0,00	0,00	13,45	15,09
PH ₃	29,17	0,00	29,17	0,00	0,00	30,63	29,66
PO ₄ ⁻³	91,10	0,00	91,10	0,00	0,00	91,10	91,10
SH ₂	23,53	0,00	22,78	0,00	0,00	22,76	23,02
SiH ₄	30,69	0,00	30,69	0,00	0,00	30,69	30,69
SiO ₂	24,90	0,00	24,90	0,00	0,00	43,62	31,14
SO ₂	18,82	0,00	35,26	0,00	0,00	23,11	25,73
SO ₄ ⁻²	51,71	0,00	51,71	0,00	0,00	51,71	51,71

Tabela 168: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores MP2/cc-pVTZ

MP2/cc-pVTZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	17,74	0,00	17,74	0,00	0,00	17,74	17,74
BH ₄ ⁻	28,35	0,00	28,35	0,00	0,00	28,35	28,35
CO ₃ ²⁻	28,56	0,00	28,56	0,00	0,00	16,70	24,60
HCO ₃ ⁻	29,58	-2,70	27,82	0,00	0,00	15,72	24,37
NO ₂ ⁻	9,70	0,00	29,18	0,00	0,00	12,99	17,29
NO ₃ ⁻	28,47	0,00	28,47	0,00	0,00	11,32	22,75
OH ⁻	6,58	0,00	6,58	0,00	0,00	11,08	8,08
AlF ₂ H	19,10	0,00	22,06	0,00	0,00	21,08	20,75
AlF ₃	17,90	0,00	17,90	0,00	0,00	15,54	17,11
AlFH ₂	21,73	0,00	23,96	0,00	0,00	26,76	24,15
AlH ₃	30,07	0,00	30,07	0,00	0,00	24,08	28,07
BF ₃	14,81	0,00	14,81	0,00	0,00	10,63	13,42
BH ₃	17,63	0,00	17,63	0,00	0,00	11,80	15,69
C ₂ H ₄ O ₂	31,99	2,00	35,65	0,00	0,00	22,78	30,14
C ₃ H ₆ O ₂	45,63	1,95	45,95	0,00	0,00	32,61	41,40
C ₄ H ₆	57,17	-17,76	61,14	0,00	0,00	26,49	48,27
C ₄ H ₈ O ₂	60,35	-0,83	56,37	0,00	0,00	42,32	53,01
C ₆ H ₆	75,73	0,00	75,73	0,00	0,00	33,33	61,59
CF ₄	15,30	0,00	15,30	0,00	0,00	15,30	15,30
CH ₂ F ₂	13,76	0,00	15,56	0,00	0,00	14,65	14,65
CH ₃ F	14,20	0,00	14,20	0,00	0,00	15,19	14,53
CH ₄	14,74	0,00	14,74	0,00	0,00	14,74	14,74
CHF ₃	15,45	0,00	15,45	0,00	0,00	14,09	14,99
CO	10,07	0,00	10,07	0,00	0,00	14,35	11,49
CO ₂	9,95	0,00	9,95	0,00	0,00	25,34	15,08
F ₂	2,88	0,00	2,88	0,00	0,00	9,37	5,04
H ₂	2,58	0,00	2,58	0,00	0,00	6,47	3,88
H ₂ CO ₃	25,18	-1,61	27,50	0,00	0,00	14,56	22,41
H ₂ PO ₄ ⁻	33,59	0,01	37,73	0,00	-0,58	32,03	34,45
H ₂ SO ₄	29,75	-0,01	33,60	0,00	-0,74	28,60	30,65
H ₃ PO ₄	33,88	0,32	31,81	-1,54	0,21	31,84	32,51
HCl	10,08	0,00	10,08	0,00	0,00	14,74	11,63
HF	2,73	0,00	2,73	0,00	0,00	5,26	3,57
HPO ₄ ²⁻	38,97	0,00	35,34	1,01	0,00	34,72	36,34
HSO ₄ ⁻	32,07	1,74	31,89	0,00	0,00	30,78	31,58
LiH	26,34	0,00	26,34	0,00	0,00	21,40	24,69
NaCl	23,55	0,00	23,55	0,00	0,00	28,97	25,36
NaH	35,18	0,00	35,18	0,00	0,00	43,37	37,91
O ₂	4,31	0,00	4,84	0,00	0,00	9,70	6,28
O ₃	6,85	0,00	17,19	0,00	0,00	9,36	11,13
PH ₃	26,12	0,00	26,12	0,00	0,00	24,57	25,60
PO ₄ ³⁻	36,52	0,00	36,52	0,00	0,00	36,52	36,52
SH ₂	15,03	0,00	19,80	0,00	0,00	19,24	18,02
SiH ₄	28,25	0,00	28,25	0,00	0,00	28,25	28,25
SiO ₂	22,34	0,00	22,34	0,00	0,00	38,84	27,84
SO ₂	14,94	0,00	30,94	0,00	0,00	18,62	21,50
SO ₄ ²⁻	31,37	0,00	31,37	0,00	0,00	31,37	31,37

Tabela 169: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores MP2/aug-cc-pVTZ

MP2/aug-cc-pVTZ							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF ₄ ⁻	23,582	0	23,582	0	0	23,582	23,582
BH ₄ ⁻	37,853	0	37,853	0	0	37,853	37,853
CO ₃ ⁻²	62,005	0	62,005	0	0	41,51	55,173
HCO ₃ ⁻	40,251	-1,941	38,761	0	0	25,524	34,845
NO ₂ ⁻	20,777	0	42,542	0	0	29,241	30,853
NO ₃ ⁻	39,84	0	39,84	0	0	21,56	33,747
OH ⁻	26,906	0	26,906	0	0	20,891	24,901
AlF ₂ H	21,908	0	24,811	0	0	23,856	23,525
AlF ₃	21,059	0	21,059	0	0	18,692	20,270
AlFH ₂	24,513	0	26,7	0	0	29,373	26,862
AlH ₃	32,888	0	32,888	0	0	26,978	30,918
BF ₃	17,103	0	17,103	0	0	13,389	15,865
BH ₃	18,229	0	18,229	0	0	14,044	16,834
C ₂ H ₄ O ₂	36,287	1,689	39,373	0	-0,001	26,443	34,034
C ₃ H ₆ O ₂	0	0	0	0	0	0	0,000
C ₄ H ₆	60,184	-17,815	65,683	0	0	36,897	54,255
C ₄ H ₈ O ₂	0	0	0	0	0	0	0,000
C ₆ H ₆	80,394	0	80,394	0	0	44,736	68,508
CF ₄	19,06	0	19,06	0	0	19,06	19,060
CH ₂ F ₂	16,362	0	18,619	0	0	17,393	17,458
CH ₃ F	16,141	0	16,141	0	0	17,818	16,700
CH ₄	16,381	0	16,381	0	0	16,381	16,381
CHF ₃	18,832	0	18,832	0	0	17,404	18,356
CO	11,98	0	11,98	0	0	15,856	13,272
CO ₂	12,916	0	12,916	0	0	27,911	17,914
F ₂	6,149	0	6,149	0	0	11,23	7,843
H ₂	4,58	0	4,58	0	0	6,368	5,176
H ₂ CO ₃	29,291	-1,445	31,574	0	0	19,171	26,679
H ₂ PO ₄ ⁻	45,003	0,007	48,185	-0,001	-0,315	44,017	45,735
H ₂ SO ₄	35,568	-0,005	38,291	0,001	-0,396	34,417	36,092
H ₃ PO ₄	39,278	0,236	37,612	-1,181	0,169	37,749	38,213
HCl	16,468	0	16,468	0	0	18,174	17,037
HF	4,96	0	4,96	0	0	6,373	5,431
HPO ₄ ⁻²	63,737	0,001	61,872	0,615	-0,001	60,557	62,055
HSO ₄ ⁻	42,513	1,012	42,23	0	0	41,791	42,178
LiH	27,087	0	27,087	0	0	23,293	25,822
NaCl	28,249	0	28,249	0	0	32,214	29,571
NaH	35,717	0	35,717	0	0	45,889	39,108
O ₂	8,534	0	7,672	0	0	11,848	9,351
O ₃	11,54	0	20,994	0	0	14,046	15,527
PH ₃	29,525	0	29,525	0	0	31,176	30,075
PO ₄ ⁻³	105,176	0	105,176	0	0	105,176	105,176
SH ₂	24,714	0	23,751	0	0	23,789	24,085
SiH ₄	30,484	0	30,484	0	0	30,484	30,484
SiO ₂	26,491	0	26,491	0	0	43,616	32,199
SO ₂	19,603	0	35,158	0	0	23,502	26,088
SO ₄ ⁻²	54,024	0	54,024	0	0	54,024	54,024

Tabela 170: Valores de polarizabilidade em cada direção dos tensores MP2/pc-3

MP2/pc-3							
Molécula	XX	XY	YY	XZ	YZ	ZZ	Polarizabilidade
BF_4^-	22,741	0	22,741	0	0	22,741	22,741
BH_4^-	34,496	0	34,496	0	0	34,496	34,496
CO_3^{-2}	49,859	0	49,859	0	0	33,687	44,468
HCO_3^-	38,672	-1,965	36,78	0	0	23,687	33,046
OH^-	19,51	0	19,51	0	0	15,972	18,331
AlF_2H	20,683	0,001	24,176	0	0	23,203	22,687
AlF_3	20,433	0	20,433	0	0	17,656	19,507
AlH_3	32,344	0	32,344	0	0	23,696	29,461
BF_3	16,813	0	16,813	0	0	12,996	15,541
BH_3	18,064	0	18,064	0	0	13,205	16,444
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	35,735	1,789	38,925	0	-0,001	25,917	33,526
C_4H_6	59,671	-18,244	64,628	0	0	35,842	53,380
CF_4	18,636	0	18,636	0	0	18,636	18,636
CH_2F_2	15,873	0	18,275	0	0	16,983	17,044
CH_3F	15,762	0	15,762	0	0	17,402	16,309
CH_4	16,041	0	16,041	0	0	16,041	16,041
CHF_3	18,448	0	18,448	0	0	16,911	17,936
H_2CO_3	28,646	-1,461	31,21	0	0	18,51	26,122
LiH	24,055	0	24,055	0	0	22,992	23,701
NaCl	21,701	0	21,701	0	0	30,725	24,709
NaH	31,026	0	31,026	0	0	44,316	35,456
O_2	6,989	0	7,684	0	0	11,454	8,709
O_3	10,6	0	20,455	0	0	13,191	14,749
PH_3	28,079	0	28,079	0	0	28,551	28,236
PO_4^{-3}	69,582	0	69,582	0	0	69,582	69,582
SH_2	21,777	0	21,513	0	0	21,436	21,575
SiH_4	29,309	0	29,309	0	0	29,309	29,309
SiO_2	24,044	0	24,044	0	0	43,395	30,494
SO_2	18,128	0	34,226	0	0	22,037	24,797
SO_4^{-2}	47,539	0	47,539	0	0	47,539	47,539

ANEXO D – CONJUNTO DE BASE aMCG-2d1f

H 0				B 0			
s 8 1.0				s 12 1.0			
3058.04521000	0.00001380			0.1362079E+06	0.9135172E-05	p 6 1.0	
562.14673000	0.00008870			0.2349606E+05	0.6506398E-04	67.74352350	0.00052579
126.84878400	0.00051078			0.4983390E+04	0.4035718E-03	19.63773150	0.00312427
33.97801410	0.00233333			0.1271634E+04	0.1947048E-02	6.52480764	0.01411881
10.44789930	0.00899354			0.3820118E+03	0.7620461E-02	2.39490403	0.04693507
3.56634617	0.02969087			0.1322024E+03	0.2450523E-01	0.93593065	0.12988209
1.30685012	0.08209472			0.5157267E+02	0.6494904E-01	0.37534058	0.25411817
0.49714156	0.17789685			0.2219158E+02	0.1398014E+00	p 1 1.0	
s 1 1.0				0.1030660E+02	0.2394249E+00	0.14887604	1.0
0.18985874	1.0			0.5055578E+01	0.3123089E+00	p 1 1.0	
s 1 1.0				0.2562862E+01	0.2645961E+00	0.05629019	1.0
0.07039172	1.0			0.1313859E+01	0.1031251E+00	p 1 1.0	
s 1 1.0				s 5 1.0		0.01955421	1.0
0.02450176	1.0			0.1030660E+02	-0.4466767E-02	p 1 1.0	
s 1 1.0				0.5055578E+01	-0.2087170E-01	0.00601504	1.0
0.00774287	1.0			0.2562862E+01	-0.5250531E-01	d 1 1.0	
p 1 1.0				0.1313859E+01	-0.4874136E-01	0.93593065	1.0
1.30685012	1.0			0.6665171E+00	0.9308254E-01	d 1 1.0	
p 1 1.0				s 1 1.0		0.37534058	1.0
0.49714156	1.0			0.32740352	1.0	f 1 1.0	
d 1 1.0				s 1 1.0		0.93593065	1.0
1.30685012	1.0			0.15238248	1.0	****	
****				s 1 1.0			
				0.06575618	1.0		
				s 1 1.0			
				0.02574294	1.0		
Li 0				C 0			
s 13 1.0				s 13 1.0			
0.4778787E+05	0.8669977E-05			0.2331839E+06	0.6047215E-05	p 8 1.0	
0.9161375E+04	0.5330985E-04			0.6401888E+05	0.1939074E-04	284.74030900	0.00010119
0.2060587E+04	0.3171491E-03			0.1929908E+05	0.8970099E-04	99.52532340	0.00043392
0.5358317E+03	0.1530956E-02			0.6331665E+04	0.3267723E-03	37.96854620	0.00212336
0.1587426E+03	0.6262535E-02			0.2240707E+04	0.1124270E-02	15.52954430	0.00777365
0.5279662E+02	0.2170604E-01			0.8477573E+03	0.3520893E-02	6.68923534	0.02388940
0.1942614E+02	0.6289171E-01			0.3398682E+03	0.1025528E-01	2.98068379	0.06442976
0.7792103E+01	0.1459733E+00			0.1430987E+03	0.2765543E-01	1.34963288	0.14718733
0.3357615E+01	0.2590537E+00			0.6271622E+02	0.6824342E-01	0.60997826	0.25291188
0.1531564E+01	0.3335832E+00			0.2835808E+02	0.1489797E+00	p 1 1.0	
0.7287650E+00	0.2547696E+00			0.1311172E+02	0.2729334E+00	0.27030287	1.0
0.3564579E+00	0.7328516E-01			0.6144153E+01	0.3809868E+00	p 1 1.0	
0.1766108E+00	0.3144556E-02			0.2892125E+01	0.3130428E+00	0.11536212	1.0
s 7 1.0				s 3 1.0		p 1 1.0	
0.7792103E+01	-0.5481159E-03			0.6144153E+01	-0.2465522E-01	0.04657906	1.0
0.3357615E+01	-0.3181796E-02			0.2892125E+01	-0.6407303E-01	p 1 1.0	
0.1531564E+01	-0.1200095E-01			0.1355371E+01	0.2773527E-01	0.01747719	1.0
0.7287650E+00	-0.3489986E-01			s 1 1.0		d 1 1.0	
0.3564579E+00	-0.4385566E-01			0.62678477	1.0	1.34963288	1.0
0.1766108E+00	0.1937718E-01			s 1 1.0		d 1 1.0	
0.8734439E-01	0.1569748E+00			0.28348597	1.0	0.60997826	1.0
s 1 1.0				s 1 1.0		f 1 1.0	
0.04248947	1.0			0.12428846	1.0	1.34963288	1.0
s 1 1.0				s 1 1.0		****	
0.02003440	1.0			0.05235395	1.0		
s 1 1.0							
0.00902278	1.0						
s 1 1.0							
0.00382467	1.0						
p 1 1.0							
1.531564	1.0						
p 1 1.0							
0.7287650	1.0						
d 1 1.0							
1.531564	1.0						
****							
				N 0			
				s 12 1.0			
				0.2229802E+06	0.9746120E-05	p 8 1.0	
				0.5076906E+05	0.4460956E-04	939.01644300	0.00003054
				0.1338405E+05	0.2228794E-03	212.11295300	0.00032961
				0.4020764E+04	0.8943711E-03	58.92586620	0.00249854
				0.1354684E+04	0.3152335E-02	19.43426420	0.01224233
				0.5037939E+03	0.9781208E-02	7.34568201	0.04183356
				0.2035304E+03	0.2714970E-01	3.07168437	0.10855950
				0.8791112E+02	0.6770256E-01	1.37176603	0.20354815
				0.3995516E+02	0.1494116E+00	0.63156935	0.27603622
				0.1880585E+02	0.2870830E+00	p 1 1.0	
				0.9021535E+01	0.4567606E+00	0.28938641	1.0
				0.4341220E+01	0.4951127E+00	p 1 1.0	
				s 4 1.0		0.12738840	1.0
				0.1880585E+02	0.7210049E-02	p 1 1.0	
				0.9021535E+01	0.3235620E-01	0.05200616	1.0
				0.4341220E+01	0.6910747E-01	p 1 1.0	
				0.2062356E+01	-0.1433597E-01	0.01900778	1.0
				s 1 1.0		d 1 1.0	
				0.95194580	1.0	1.37176603	1.0
				s 1 1.0		d 1 1.0	
				0.42017877	1.0	0.63156935	1.0
				s 1 1.0		f 1 1.0	
				0.17454432	1.0	1.37176603	1.0
				s 1 1.0		****	
				0.06715889	1.0		

```

O 0
s 13 1.0
0.5582114E+06      0.4275864E-05      p 8 1.0
0.1368794E+06      0.1720109E-04      717.69437800      0.00007210
0.3794324E+05      0.8327725E-04      222.48633400      0.00041717
0.1174331E+05      0.3248910E-03      77.39321400      0.00231289
0.4007835E+04      0.1145969E-02      29.59981810      0.00964182
0.1489687E+04      0.3617140E-02      12.19586710      0.03196888
0.5955926E+03      0.1042167E-01      5.30425841      0.08700268
0.2529738E+03      0.2752744E-01      2.38602989      0.18071144
0.1127397E+03      0.6637249E-01      1.08772013      0.26911243
0.5206625E+02      0.1428540E+00      p 1 1.0
0.2461029E+02      0.2626239E+00      0.49237886      1.0
0.1175876E+02      0.3762727E+00      p 1 1.0
0.5609102E+01      0.3251112E+00      0.21685700      1.0
s 3 1.0      p 1 1.0
0.1175876E+02      -0.2494041E-01      0.09105215      1.0
0.5609102E+01      -0.6345521E-01      p 1 1.0
0.2638246E+01      0.3369426E-01      0.03571087      1.0
s 1 1.0      d 1 1.0
1.20845533      1.0      1.08772013      1.0
s 1 1.0      d 1 1.0
0.53240496      1.0      0.49237886      1.0
s 1 1.0      f 1 1.0
0.22281932      1.0      1.08772013      1.0
s 1 1.0      ****
0.08749151      1.0

F 0
s 15 1.0
0.1254879E+07      0.2269611E-05      p 10 1.0
0.3103202E+06      0.8969130E-05      900.62953300      0.00007476
0.8646111E+05      0.4334441E-04      329.58556400      0.00027624
0.2685480E+05      0.1682891E-03      134.80671300      0.00124786
0.9200287E+04      0.5907797E-03      60.49132700      0.00406220
0.3439908E+04      0.1848445E-02      29.23007080      0.01148534
0.1388820E+04      0.5263673E-02      14.92927420      0.02769537
0.5990829E+03      0.1371282E-01      7.91109338      0.05987097
0.2731852E+03      0.3285811E-01      4.26913828      0.11299538
0.1303001E+03      0.7181309E-01      2.30285579      0.17846919
0.6431867E+02      0.1403172E+00      1.21880150      0.23553219
0.3251040E+02      0.2346832E+00      p 1 1.0
0.1664900E+02      0.3070043E+00      0.62123491      1.0
0.8547168E+01      0.2532873E+00      p 1 1.0
0.4352237E+01      0.8950506E-01      0.29933139      1.0
s 8 1.0      p 1 1.0
0.2731852E+03      -0.1147897E-03      0.13382558      1.0
0.1303001E+03      -0.7254115E-03      p 1 1.0
0.6431867E+02      -0.3311450E-02      0.05449208      1.0
0.3251040E+02      -0.1183097E-01      d 1 1.0
0.1664900E+02      -0.3487538E-01      1.2188015      1.0
0.8547168E+01      -0.6587036E-01      d 1 1.0
0.4352237E+01      -0.2403618E-01      0.62123491      1.0
0.2174938E+01      0.1729618E+00      f 1 1.0
s 1 1.0      1.2188015      1.0
1.05538961      1.0      ****
s 1 1.0
0.49203767      1.0
s 1 1.0
0.21806764      1.0
s 1 1.0
0.09090321      1.0

```

```

Na 0
s 17 1.0
0.7871491E+07      0.4099977E-06      s 1 1.0
0.1509524E+07      0.2529910E-05      0.08515734      1.0
0.3336550E+06      0.1556969E-04      s 1 1.0
0.8402111E+05      0.7944839E-04      0.03332362      1.0
0.2382709E+05      0.3508739E-03      s 1 1.0
0.7521495E+04      0.1354138E-02      0.01205512      1.0
0.2612441E+04      0.4627774E-02      s 1 1.0
0.9868624E+03      0.1413335E-01      0.00398509      1.0
0.4007682E+03      0.3857059E-01      p 13 1.0
0.1729478E+03      0.9272417E-01      304772.052      0.00000001
0.7839361E+02      0.1887863E+00      51868.5564      0.00000019
0.3689341E+02      0.3025595E+00      10899.3495      0.00000260
0.1781878E+02      0.3215419E+00      2768.04134      0.00002500
0.8730257E+01      0.1634384E+00      831.626505      0.00017836
0.4288985E+01      0.2307460E-01      289.318371      0.00096822
0.2088426E+01      0.3854528E-03      114.083758      0.00406825
0.9962757E+00      -0.2759984E-02      49.9091220      0.01337868
s 10 1.0
0.4007682E+03      0.1605820E-03      23.7111447      0.03577000
0.1729478E+03      0.1268829E-02      11.9742900      0.08009778
0.7839361E+02      0.6371995E-02      6.29187187      0.14765598
0.3689341E+02      0.2424339E-01      3.36706105      0.22046326
0.1781878E+02      0.6283925E-01      1.79626876      0.27165467
0.8730257E+01      0.6288374E-01      p 1 1.0
0.4288985E+01      -0.1041620E+00      0.93508056      1.0
0.2088426E+01      -0.3656449E+00      p 1 1.0
0.9962757E+00      -0.4639418E+00      0.46493507      1.0
0.4602506E+00      -0.1997401E+00      p 1 1.0
0.3689341E+02      0.6532126E-04      0.21612715      1.0
0.1781878E+02      0.1367408E-03      p 1 1.0
0.8730257E+01      -0.2584374E-03      0.09194080      1.0
0.4288985E+01      0.9294344E-03      d 1 1.0
0.2088426E+01      0.3525676E-02      0.93508056      1.0
0.9962757E+00      0.1996233E-01      d 1 1.0
0.4602506E+00      0.6224033E-01      0.46493507      1.0
0.2035271E+00      0.3444912E-01      f 1 1.0
                                0.93508056      1.0
                                ****

Al 0
s 19 1.0
0.2707698E+07      -0.2339992E-05      s 1 1.0      d 1 1.0
0.5351732E+06      -0.1380995E-04      0.12456395      1.0      1.139521      1.0
0.1215583E+06      -0.8235973E-04      s 1 1.0      d 1 1.0
0.3144382E+05      -0.4048587E-03      0.06810175      1.0      0.556553      1.0
0.9179336E+04      -0.1712164E-02      s 1 1.0      f 1 1.0
0.2996932E+04      -0.6239421E-02      0.03537331      1.0      1.139521      1.0
0.1084418E+04      -0.1965969E-01      s 1 1.0      ****
0.4309582E+03      -0.5308403E-01      0.01729853      1.0
0.1864048E+03      -0.1197876E+00      p 14 1.0
0.8696144E+02      -0.2165585E+00      0.2525820E+04      0.6291954E-04
0.4336195E+02      -0.2933492E+00      0.1089142E+04      0.1321193E-03
0.2290171E+02      -0.2648596E+00      0.4954179E+03      0.6446755E-03
0.1269605E+02      -0.1365302E+00      0.2357255E+03      0.1966910E-02
0.7321080E+01      -0.3490619E-01      0.1163407E+03      0.6199016E-02
0.4351635E+01      -0.4351548E-02      0.5905954E+02      0.1689688E-01
0.2642195E+01      -0.1001767E-02      0.3057906E+02      0.4279701E-01
0.1623966E+01      -0.3982067E-03      0.1601314E+02      0.9575593E-01
0.1001275E+01      -0.6964533E-04      0.8409879E+01      0.1803901E+00
0.6137034E+00      -0.4109411E-04      0.4392450E+01      0.2693558E+00
s 11 1.0
0.8696144E+02      -0.6097075E-02      0.2262404E+01      0.3115544E+00
0.4336195E+02      -0.2603259E-01      0.1139521E+01      0.2295348E+00
0.2290171E+02      -0.5725685E-01      0.5565530E+00      0.6913467E-01
0.1269605E+02      -0.5182846E-01      0.2613755E+00      0.3998092E-02
0.7321080E+01      0.4096778E-01      p 8 1.0
0.4351635E+01      0.1846914E+00      0.1601314E+02      0.2160252E-03
0.2642195E+01      0.3091826E+00      0.8409879E+01      0.7326528E-03
0.1623966E+01      0.3306948E+00      0.4392450E+01      0.1709769E-02
0.1001275E+01      0.2198509E+00      0.2262404E+01      0.3802074E-02
0.6137034E+00      0.6811858E-01      0.1139521E+01      0.7452803E-02
0.3705587E+00      0.1215451E-01      0.5565530E+00      -0.3243011E-01
s 8 1.0
0.7321080E+01      -0.7075149E-03      0.2613755E+00      -0.1666316E+00
0.4351635E+01      0.1234230E-02      0.1170415E+00      -0.3182499E+00
0.2642195E+01      -0.1645172E-01      p 1 1.0
0.1623966E+01      -0.3183205E-01      0.04955357      1.0
0.1001275E+01      -0.1025436E+00      p 1 1.0
0.6137034E+00      -0.4603275E-01      0.01967035      1.0
0.3705587E+00      0.4606118E-01      p 1 1.0
0.2184306E+00      0.2856967E+00      0.00246981      1.0

```

```
Si 0
s 16 1.0
0.8051611E+07      0.6999837E-06      s 1 1.0      p 1 1.0
0.1771833E+07      0.3449992E-05      0.42167649      1.0      0.01162909      1.0
0.4394643E+06      0.1887997E-04      s 1 1.0      d 1 1.0
0.1216810E+06      0.8592987E-04      0.18447904      1.0      0.9540612      1.0
0.3725266E+05      0.3483195E-03      s 1 1.0      d 1 1.0
0.1249008E+05      0.1257799E-02      0.07655085      1.0      0.4404638      1.0
0.4542382E+04      0.4100610E-02      s 1 1.0      f 1 1.0
0.1774804E+04      0.1214370E-01      0.02984186      1.0      0.9540612      1.0
0.7379086E+03      0.3269930E-01      p 11 1.0      ****
0.3233538E+03      0.7899269E-01      0.9634687E+04      0.9229357E-05
0.1479156E+03      0.1654544E+00      0.2657004E+04      0.7037829E-04
0.6995969E+02      0.2803689E+00      0.8301086E+03      0.4885070E-03
0.3388577E+02      0.3311067E+00      0.2890658E+03      0.2685670E-02
0.1664792E+02      0.2025083E+00      0.1103847E+03      0.1189442E-01
0.8216993E+01      0.4050733E-01      0.4547807E+02      0.4188949E-01
0.4035653E+01      0.2233923E-02      0.1988876E+02      0.1170035E+00
s 10 1.0      0.9083579E+01      0.2383863E+00
0.1774804E+04      -0.2118903E-04      0.4262660E+01      0.3415915E+00
0.7379086E+03      -0.1967637E-03      0.2022135E+01      0.3207450E+00
0.3233538E+03      -0.1200255E-02      0.9540612E+00      0.1331999E+00
0.1479156E+03      -0.5800989E-02      p 8 1.0
0.6995969E+02      -0.2197755E-01      0.1103847E+03      -0.5145435E-05
0.3388577E+02      -0.6105816E-01      0.4547807E+02      -0.1010848E-03
0.1664792E+02      -0.7638452E-01      0.1988876E+02      -0.6514020E-03
0.8216993E+01      0.6754818E-01      0.9083579E+01      -0.2394756E-02
0.4035653E+01      0.3557485E+00      0.4262660E+01      -0.4785992E-02
0.1953441E+01      0.3734387E+00      0.2022135E+01      -0.1099932E-01
s 7 1.0      0.9540612E+00      0.1890355E-01
0.6995969E+02      0.9455866E-04      0.4404638E+00      0.1771892E+00
0.3388577E+02      0.3815273E-03      p 1 1.0
0.1664792E+02      0.1330022E-02      0.19576859      1.0
0.8216993E+01      -0.1565706E-02      p 1 1.0
0.4035653E+01      -0.1785885E-01      0.08241492      1.0
0.1953441E+01      -0.1020090E+00      p 1 1.0
0.9230169E+00      -0.1402673E+00      0.03233179      1.0

P 0
s 17 1.0
0.2390974E+07      0.3779987E-05      s 1 1.0      p 1 1.0
0.5346860E+06      0.1807995E-04      0.41758706      1.0      0.02103229      1.0
0.1357325E+06      0.9565973E-04      s 1 1.0      d 1 1.0
0.3876087E+05      0.4146788E-03      0.22046161      1.0      1.433099      1.0
0.1233934E+05      0.1581756E-02      s 1 1.0      d 1 1.0
0.4339527E+04      0.5282425E-02      0.11122216      1.0      0.7745933      1.0
0.1670741E+04      0.5282425E-02      s 1 1.0      f 1 1.0
0.6978396E+03      0.1557918E-01      0.05313563      1.0      1.433099      1.0
0.3133616E+03      0.4040765E-01      p 12 1.0      ****
0.1499143E+03      0.9087757E-01      0.3913378E+04      0.5505268E-04
0.7572019E+02      0.1718884E+00      0.1271029E+04      0.2881525E-03
0.4001429E+02      0.2601371E+00      0.4597804E+03      0.1562718E-02
0.2192386E+02      0.2866758E+00      0.1829169E+03      0.6556857E-02
0.1234188E+02      0.1973053E+00      0.7902836E+02      0.2244822E-01
0.7074110E+01      0.6989209E-01      0.3661470E+02      0.6221732E-01
0.4091213E+01      0.1039484E-01      0.1796340E+02      0.1371701E+00
0.2365843E+01      0.1348799E-02      0.9215095E+01      0.2294781E+00
0.1355618E+01      0.3998993E-03      0.4880975E+01      0.2936591E+00
s 8 1.0      0.2635883E+01      0.2741997E+00
0.7572019E+02      -0.1191578E-01      0.1433099E+01      0.1496193E+00
0.4001429E+02      -0.4067457E-01      0.7745933E+00      0.3411505E-01
0.2192386E+02      -0.6270366E-01      p 6 1.0
0.1234188E+02      -0.4263128E-02      0.9215095E+01      -0.1121793E-02
0.7074110E+01      0.1555822E+00      0.4880975E+01      -0.3088822E-02
0.4091213E+01      0.3631948E+00      0.2635883E+01      -0.8314216E-02
0.2365843E+01      0.4650685E+00      0.1433099E+01      0.9715775E-02
0.1355618E+01      0.3356829E+00      0.7745933E+00      0.1022075E+00
s 6 1.0      0.4109949E+00      0.2401691E+00
0.1234188E+02      -0.4321087E-03      p 1 1.0
0.7074110E+01      0.2539890E-03      0.21138866      1.0
0.4091213E+01      -0.2109565E-01      p 1 1.0
0.2365843E+01      -0.7568822E-01      0.10407031      1.0
0.1355618E+01      -0.1354170E+00      p 1 1.0
0.7627281E+00      0.4558199E-01      0.04842720      1.0
```

```

s 0
s 18 1.0
0.1437368E+08      0.4599494E-06      s 1 1.0      p 1 1.0
0.3488084E+07      0.1909847E-05      1.00357259      1.0      0.42758792      1.0
0.9485634E+06      0.9479210E-05      s 1 1.0      p 1 1.0
0.2865991E+06      0.3833679E-04      0.46429720      1.0      0.20082092      1.0
0.9538514E+05      0.1399083E-03      s 1 1.0      p 1 1.0
0.3466990E+05      0.4552525E-03      0.20270956      1.0      0.08655537      1.0
0.1364455E+05      0.1343980E-02      s 1 1.0      p 1 1.0
0.5764593E+04      0.3627065E-02      0.08280410      1.0      0.03368850      1.0
0.2592088E+04      0.9032679E-02      p 13 1.0      d 1 1.0
0.1229903E+04      0.2085470E-01      0.1694829E+05      0.5818042E-05      1.597934      1.0
0.6105212E+03      0.4463800E-01      0.4877516E+04      0.4010388E-04      d 1 1.0
0.3143459E+03      0.8778818E-01      0.1614204E+04      0.2490225E-03      0.8490678      1.0
0.1664410E+03      0.1551642E+00      0.6045134E+03      0.1201602E-02      f 1 1.0
0.8985191E+02      0.2359473E+00      0.2520823E+03      0.4684221E-02      1.597934      1.0
0.4903169E+02      0.2807890E+00      0.1151777E+03      0.1479490E-01      ****
0.2681499E+02      0.2184316E+00      0.5673954E+02      0.3871463E-01
0.1457130E+02      0.8274414E-01      0.2965480E+02      0.8504993E-01
0.7800226E+01      0.9539611E-02      0.1618070E+02      0.1542032E+00
s 7 1.0      0.5139082E+01      0.9069720E+01      0.2287842E+00
0.1664410E+03      -0.3354175E-02      0.2896500E+01      0.2789933E+00
0.8985191E+02      -0.1568849E-01      0.1597934E+01      0.2529195E+00
0.4903169E+02      -0.4333698E-01      p 8 1.0      0.1243926E+00
0.2681499E+02      -0.7092630E-01      0.5673954E+02      -0.1083096E-03
0.1457130E+02      -0.1059943E-01      0.2965480E+02      -0.5589229E-03
0.7800226E+01      0.1941045E+00      0.1618070E+02      -0.1869500E-02
0.4078241E+01      0.3608163E+00      0.9069720E+01      -0.3735310E-02
s 4 1.0      0.5139082E+01      -0.7489923E-02
0.1457130E+02      0.2244776E-03      0.2896500E+01      -0.1053618E-01
0.7800226E+01      -0.3171680E-02      0.1597934E+01      0.2509186E-01
0.4078241E+01      -0.5007939E-01      0.8490678E+00      0.1581995E+00
0.2064733E+01      -0.1661427E+00

C1 0
s 17 1.0
0.1482330E+08      0.5300036E-06      s 1 1.0      p 1 1.0
0.3245795E+07      0.2649974E-05      0.73998499      1.0      0.03851739      1.0
0.8031468E+06      0.1450988E-04      s 1 1.0      d 1 1.0
0.2225333E+06      0.6581952E-04      0.34617351      1.0      0.9289861      1.0
0.6841469E+05      0.2645080E-03      s 1 1.0      d 1 1.0
0.2312525E+05      0.9419436E-03      0.15381544      1.0      0.46544088      1.0
0.8515975E+04      0.3010961E-02      s 1 1.0      f 1 1.0
0.3385490E+04      0.8705665E-02      0.06432348      1.0      0.9289861      1.0
0.1439714E+04      0.2284909E-01      p 12 1.0      ****
0.6489733E+03      0.5421235E-01      0.1342285E+05      0.1113187E-04
0.3072568E+03      0.1140771E+00      0.3866824E+04      0.7667306E-04
0.1514009E+03      0.2051172E+00      0.1275011E+04      0.4794787E-03
0.7693713E+02      0.2917007E+00      0.4734797E+03      0.2335426E-02
0.3995329E+02      0.2917007E+00      0.1948474E+03      0.9139682E-02
0.2100904E+02      0.2816841E+00      0.8743224E+02      0.2877779E-01
0.1108474E+02      0.1415268E+00      0.4209305E+02      0.7402114E-01
0.5814849E+01      0.2548877E-01      0.2139386E+02      0.1522906E+00
s 9 1.0      0.1129498E+02      0.1129498E+02      0.2436153E+00
0.6489733E+03      -0.4106361E-03      0.6095058E+01      0.3035689E+00
0.3072568E+03      -0.2530926E-02      0.3307835E+01      0.2613778E+00
0.1514009E+03      -0.1070900E-01      0.1776485E+01      0.1107208E+00
0.7693713E+02      -0.3412307E-01      p 6 1.0
0.3995329E+02      -0.7086086E-01      0.2139386E+02      -0.9628633E-03
0.2100904E+02      -0.5604441E-01      0.1129498E+02      -0.3085380E-02
0.1108474E+02      0.1110435E+00      0.6095058E+01      -0.7464407E-02
0.5814849E+01      0.3561520E+00      0.3307835E+01      -0.9607563E-02
0.3005201E+01      0.2301273E+00      0.1776485E+01      0.4760197E-01
s 6 1.0      0.9289861E+00      0.2030286E+00
0.3995329E+02      0.9692920E-03      p 1 1.0
0.2100904E+02      0.9976198E-03      0.46544088      1.0
0.1108474E+02      -0.2572041E-02      p 1 1.0
0.5814849E+01      -0.3560502E-01      0.21983942      1.0
0.3005201E+01      -0.1530005E+00      p 1 1.0
0.1516208E+01      -0.9949557E-01      0.09631864      1.0

```


ANEXO E – CONJUNTO DE BASE aMCG-3d2f1g

H 0			Li 0		
s 8 1.0			s 13 1.0		
3058.04521000	0.00001380		0.4778787E+05	0.8669977E-05	s 1 1.0
562.14673000	0.00008870		0.9161375E+04	0.5330985E-04	0.04248947 1.0
126.84878400	0.00051078		0.2060587E+04	0.3171491E-03	s 1 1.0
33.97801410	0.00233333		0.5358317E+03	0.1530956E-02	0.02003440 1.0
10.44789930	0.00899354		0.1587426E+03	0.6262535E-02	s 1 1.0
3.56634617	0.02969087		0.5279662E+02	0.2170604E-01	0.00902278 1.0
1.30685012	0.08209472		0.1942614E+02	0.6289171E-01	s 1 1.0
0.49714156	0.17789685		0.7792103E+01	0.1459733E+00	0.00382467 1.0
s 1 1.0			0.3357615E+01	0.2590537E+00	p 1 1.0
0.18985874	1.0		0.1531564E+01	0.3335832E+00	1.531564 1.0
s 1 1.0			0.7287650E+00	0.2547696E+00	p 1 1.0
0.07039172	1.0		0.3564579E+00	0.7328516E-01	0.7287650 1.0
s 1 1.0			0.1766108E+00	0.3144556E-02	p 1 1.0
0.02450176	1.0		s 7 1.0		0.3564579 1.0
s 1 1.0			0.7792103E+01	-0.5481159E-03	d 1 1.0
0.00774287	1.0		0.3357615E+01	-0.3181796E-02	1.531564 1.0
p 1 1.0			0.1531564E+01	-0.1200095E-01	d 1 1.0
1.30685012	1.0		0.7287650E+00	-0.3489986E-01	0.7287650 1.0
p 1 1.0			0.3564579E+00	-0.4385566E-01	f 1 1.0
0.49714156	1.0		0.1766108E+00	0.1937718E-01	1.531564 1.0
p 1 1.0			0.8734439E-01	0.1569748E+00	****
0.18985874	1.0				
d 1 1.0					
1.30685012	1.0				
d 1 1.0					
0.49714156	1.0				
f 1 1.0					
1.30685012	1.0				
****					
			B 0		
			s 12 1.0		p 6 1.0
			0.1362079E+06	0.9135172E-05	67.74352350 0.00052579
			0.2349606E+05	0.6506398E-04	19.63773150 0.00312427
			0.4983390E+04	0.4035718E-03	6.52480764 0.01411881
			0.1271634E+04	0.1947048E-02	2.39490403 0.04693507
			0.3820118E+03	0.7620461E-02	0.93593065 0.12988209
			0.1322024E+03	0.2450523E-01	0.37534058 0.25411817
			0.5157267E+02	0.6494904E-01	p 1 1.0
			0.2219158E+02	0.1398014E+00	0.14887604 1.0
			0.1030660E+02	0.2394249E+00	p 1 1.0
			0.5055578E+01	0.3123089E+00	0.05629019 1.0
			0.2562862E+01	0.2645961E+00	p 1 1.0
			0.1313859E+01	0.1031251E+00	0.01955421 1.0
			s 5 1.0		p 1 1.0
			0.1030660E+02	-0.4466767E-02	0.00601504 1.0
			0.5055578E+01	-0.2087170E-01	d 1 1.0
			0.2562862E+01	-0.5250531E-01	0.93593065 1.0
			0.1313859E+01	-0.4874136E-01	d 1 1.0
			0.6665171E+00	0.9308254E-01	0.37534058 1.0
			s 1 1.0		d 1 1.0
			0.32740352 1.0		0.14887604 1.0
			s 1 1.0		f 1 1.0
			0.15238248 1.0		0.93593065 1.0
			s 1 1.0		f 1 1.0
			0.06575618 1.0		0.37534058 1.0
			s 1 1.0		g 1 1.0
			0.02574294 1.0		0.93593065 1.0
					****
			C 0		
			s 13 1.0		p 8 1.0
			0.2331839E+06	0.6047215E-05	284.74030900 0.00010119
			0.6401888E+05	0.1939074E-04	99.52532340 0.00043392
			0.1929908E+05	0.8970099E-04	37.96854620 0.00212336
			0.6331665E+04	0.3267723E-03	15.52954430 0.00777365
			0.2240707E+04	0.1124270E-02	6.68923534 0.02388940
			0.8477573E+03	0.3520893E-02	2.98068379 0.06442976
			0.3398682E+03	0.1025528E-01	1.34963288 0.14718733
			0.1430987E+03	0.2765543E-01	0.60997826 0.25291188
			0.6271622E+02	0.6824342E-01	p 1 1.0
			0.2835808E+02	0.1489797E+00	0.27030287 1.0
			0.1311172E+02	0.2729334E+00	p 1 1.0
			0.6144153E+01	0.3809868E+00	0.11536212 1.0
			0.2892125E+01	0.3130428E+00	p 1 1.0
			s 3 1.0		0.04657906 1.0
			0.6144153E+01	-0.2465522E-01	p 1 1.0
			0.2892125E+01	-0.6407303E-01	0.01747719 1.0
			0.1355371E+01	0.2773527E-01	d 1 1.0
			s 1 1.0		1.34963288 1.0
			0.62678477 1.0		
			s 1 1.0		
			0.28348597 1.0		
			s 1 1.0		
			0.12428846 1.0		
			s 1 1.0		
			0.05235395 1.0		

```

N 0
s 12 1.0
0.2229802E+06      0.9746120E-05      939.01644300      0.00003054      f 1 1.0      1.0
0.5076906E+05      0.4460956E-04      212.11295300      0.00032961      f 1 1.0
0.1338405E+05      0.2228794E-03      58.92586620      0.00249854      0.63156935      1.0
0.4020764E+04      0.8943711E-03      19.43426420      0.01224233      g 1 1.0
0.1354684E+04      0.3152335E-02      7.34568201      0.04183356      1.37176603      1.0
0.5037939E+03      0.9781208E-02      3.07168437      0.10855950      ****
0.2035304E+03      0.2714970E-01      1.37176603      0.20354815
0.8791112E+02      0.6770256E-01      0.63156935      0.27603622
0.3995516E+02      0.1494116E+00      p 1 1.0
0.1880585E+02      0.2870830E+00      0.28938641      1.0
0.9021535E+01      0.4567606E+00      p 1 1.0
0.4341220E+01      0.4951127E+00      0.12738840      1.0
s 4 1.0
0.1880585E+02      0.7210049E-02      p 1 1.0
0.9021535E+01      0.3235620E-01      0.05200616      1.0
0.4341220E+01      0.6910747E-01      p 1 1.0
0.2062356E+01      -0.1433597E-01      0.01900778      1.0
s 1 1.0
0.95194580      1.0      d 1 1.0
s 1 1.0
0.42017877      1.0      0.63156935      1.0
s 1 1.0
0.17454432      1.0      d 1 1.0
s 1 1.0
0.06715889      1.0      0.28938641      1.0

O 0
s 13 1.0
0.5582114E+06      0.4275864E-05      717.69437800      0.00007210      f 1 1.0      1.0
0.1368794E+06      0.1720109E-04      222.48633400      0.00041717      f 1 1.0
0.3794324E+05      0.8327725E-04      77.39321400      0.00231289      0.49237886      1.0
0.1174331E+05      0.3248910E-03      29.59981810      0.00964182      g 1 1.0
0.4007835E+04      0.1145969E-02      12.19586710      0.03196888      1.08772013      1.0
0.1489687E+04      0.3617140E-02      5.30425841      0.08700268      ****
0.5955926E+03      0.1042167E-01      2.38602989      0.18071144
0.2529738E+03      0.2752744E-01      1.08772013      0.26911243
0.1127397E+03      0.6637249E-01      p 1 1.0
0.5206625E+02      0.1428540E+00      0.49237886      1.0
0.2461029E+02      0.2626239E+00      p 1 1.0
0.1175876E+02      0.3762727E+00      0.21685700      1.0
0.5609102E+01      0.3251112E+00      p 1 1.0
s 3 1.0
0.1175876E+02      -0.2494041E-01      0.09105215      1.0
0.5609102E+01      -0.6345521E-01      p 1 1.0
0.2638246E+01      0.3369426E-01      0.03571087      1.0
s 1 1.0
1.20845533      1.0      d 1 1.0
s 1 1.0
0.53240496      1.0      0.49237886      1.0
s 1 1.0
0.22281932      1.0      d 1 1.0
s 1 1.0
0.08749151      1.0      0.21685700      1.0

```

```

F 0
s 15 1.0
0.1254879E+07      0.2269611E-05      p 10 1.0
0.3103202E+06      0.8969130E-05      900.62953300      0.00007476
0.8646111E+05      0.4334441E-04      329.58556400      0.00027624
0.2685480E+05      0.1682891E-03      134.80671300      0.00124786
0.9200287E+04      0.5907797E-03      60.49132700      0.00406220
0.3439908E+04      0.1848445E-02      29.23007080      0.01148534
0.1388820E+04      0.5263673E-02      14.92927420      0.02769537
0.5990829E+03      0.1371282E-01      7.91109338      0.05987097
0.2731852E+03      0.3285811E-01      4.26913828      0.11299538
0.1303001E+03      0.7181309E-01      2.30285579      0.17846919
0.6431867E+02      0.1403172E+00      1.21880150      0.23553219
0.3251040E+02      0.2346832E+00      p 1 1.0
0.1664900E+02      0.3070043E+00      0.62123491      1.0
0.8547168E+01      0.2532873E+00      p 1 1.0
0.4352237E+01      0.8950506E-01      0.29933139      1.0
s 8 1.0      p 1 1.0
0.2731852E+03      -0.1147897E-03      0.13382558      1.0
0.1303001E+03      -0.7254115E-03      p 1 1.0
0.6431867E+02      -0.3311450E-02      0.05449208      1.0
0.3251040E+02      -0.1183097E-01      d 1 1.0
0.1664900E+02      -0.3487538E-01      1.2188015      1.0
0.8547168E+01      -0.6587036E-01      d 1 1.0
0.4352237E+01      -0.2403618E-01      0.62123491      1.0
0.2174938E+01      0.1729618E+00      d 1 1.0
s 1 1.0      0.29933139      1.0
1.05538961      1.0      f 1 1.0
s 1 1.0      1.2188015      1.0
0.49203767      1.0      f 1 1.0
s 1 1.0      0.62123491      1.0
0.21806764      1.0      g 1 1.0
s 1 1.0      1.2188015      1.0
0.09090321      1.0      ****

Na 0
s 17 1.0
0.7871491E+07      0.4099977E-06      s 1 1.0      d 1 1.0
0.1509524E+07      0.2529910E-05      0.08515734      1.0      0.93508056      1.0
0.3336550E+06      0.1556969E-04      s 1 1.0      d 1 1.0
0.8402111E+05      0.7944839E-04      0.03332362      1.0      0.46493507      1.0
0.2382709E+05      0.3508739E-03      s 1 1.0      d 1 1.0
0.7521495E+04      0.1354138E-02      0.01205512      1.0      0.21612715      1.0
0.2612441E+04      0.4627774E-02      s 1 1.0      f 1 1.0
0.9868624E+03      0.1413335E-01      0.00398509      1.0      0.93508056      1.0
0.4007682E+03      0.3857059E-01      p 13 1.0      f 1 1.0
0.1729478E+03      0.9272417E-01      304772.05200000      0.00000001      0.46493507      1.0
0.7839361E+02      0.1887863E+00      51868.55640000      0.00000019      g 1 1.0
0.3689341E+02      0.3025595E+00      10899.34950000      0.00000260      0.93508056      1.0
0.1781878E+02      0.3215419E+00      2768.04134000      0.00002500      ****
0.8730257E+01      0.1634384E+00      831.62650500      0.00017836
0.4288985E+01      0.2307460E-01      289.31837100      0.00096822
0.2088426E+01      0.3854528E-03      114.08375800      0.00406825
0.9962757E+00      -0.2759984E-02      49.90912200      0.01337868
s 10 1.0      23.71114470      0.03577000
0.4007682E+03      0.1605820E-03      11.97429000      0.08009778
0.1729478E+03      0.1268829E-02      6.29187187      0.14765598
0.7839361E+02      0.6371995E-02      3.36706105      0.22046326
0.3689341E+02      0.2424339E-01      1.79626876      0.27165467
0.1781878E+02      0.6283925E-01      p 1 1.0
0.8730257E+01      0.6288374E-01      0.93508056      1.0
0.4288985E+01      -0.1041620E+00      p 1 1.0
0.2088426E+01      -0.3656449E+00      0.46493507      1.0
0.9962757E+00      -0.4639418E+00      p 1 1.0
0.4602506E+00      -0.1997401E+00      0.21612715      1.0
s 8 1.0      0.09194080      1.0
0.3689341E+02      0.6532126E-04
0.1781878E+02      0.1367408E-03
0.8730257E+01      -0.2584374E-03
0.4288985E+01      0.9294344E-03
0.2088426E+01      0.3525676E-02
0.9962757E+00      0.1996233E-01
0.4602506E+00      0.6224033E-01
0.2035271E+00      0.3444912E-01

```

```
Al 0
s 19 1.0
0.2707698E+07 -0.2339992E-05 s 1 1.0 d 1 1.0
0.5351732E+06 -0.1380995E-04 s 1 1.0 1.0 1.139521 1.0
0.1215583E+06 -0.8235973E-04 0.06810175 1.0 d 1 1.0
0.3144382E+05 -0.4048587E-03 s 1 1.0 0.556553 1.0
0.9179336E+04 -0.1712164E-02 0.03537331 1.0 d 1 1.0
0.2996932E+04 -0.6239421E-02 s 1 1.0 0.2613755 1.0
0.1084418E+04 -0.1965969E-01 0.01729853 1.0 f 1 1.0
0.4309582E+03 -0.5308403E-01 p 14 1.0 1.139521 1.0
0.1864048E+03 -0.1197876E+00 0.2525820E+04 0.6291954E-04 f 1 1.0
0.8696144E+02 -0.2165585E+00 0.1089142E+04 0.1321193E-03 0.556553 1.0
0.4336195E+02 -0.2933492E+00 0.4954179E+03 0.6446755E-03 g 1 1.0
0.2290171E+02 -0.2648596E+00 0.2357255E+03 0.1966910E-02 1.139521 1.0
0.1269605E+02 -0.1365302E+00 0.1163407E+03 0.6199016E-02 ****
0.7321080E+01 -0.3490619E-01 0.5905954E+02 0.1689688E-01
0.4351635E+01 -0.4351548E-02 0.3057906E+02 0.4279701E-01
0.2642195E+01 -0.1001767E-02 0.1601314E+02 0.9575593E-01
0.1623966E+01 -0.3982067E-03 0.8409879E+01 0.1803901E+00
0.1001275E+01 -0.6964533E-04 0.4392450E+01 0.2693558E+00
0.6137034E+00 -0.4109411E-04 0.2262404E+01 0.3115544E+00
s 11 1.0 0.1139521E+01 0.2295348E+00
0.8696144E+02 -0.6097075E-02 0.5565530E+00 0.6913467E-01
0.4336195E+02 -0.2603259E-01 0.2613755E+00 0.3998092E-02
0.2290171E+02 -0.5725685E-01 p 8 1.0
0.1269605E+02 -0.5182846E-01 0.1601314E+02 0.2160252E-03
0.7321080E+01 0.4096778E-01 0.8409879E+01 0.7326528E-03
0.4351635E+01 0.1846914E+00 0.4392450E+01 0.1709769E-02
0.2642195E+01 0.3091826E+00 0.2262404E+01 0.3802074E-02
0.1623966E+01 0.3306948E+00 0.1139521E+01 0.7452803E-02
0.1001275E+01 0.2198509E+00 0.5565530E+00 -0.3243011E-01
0.6137034E+00 0.6811858E-01 0.2613755E+00 -0.1666316E+00
0.3705587E+00 0.1215451E-01 0.1170415E+00 -0.3182499E+00
s 8 1.0
0.7321080E+01 -0.7075149E-03 p 1 1.0
0.4351635E+01 0.1234230E-02 p 1 1.0
0.2642195E+01 -0.1645172E-01 0.01967035 1.0
0.1623966E+01 -0.3183205E-01 p 1 1.0
0.1001275E+01 -0.1025436E+00 0.00725929 1.0
0.6137034E+00 -0.4603275E-01 p 1 1.0
0.3705587E+00 0.4606118E-01 0.00246981 1.0
0.2184306E+00 0.2856967E+00

Si 0
s 16 1.0
0.8051611E+07 0.6999837E-06 s 7 1.0 p 8 1.0
0.1771833E+07 0.3449992E-05 0.6995969E+02 0.9455866E-04 0.1103847E+03 -0.5145435E-05
0.4394643E+06 0.1887997E-04 0.3388577E+02 0.3815273E-03 0.4547807E+02 -0.1010848E-03
0.1216810E+06 0.8592987E-04 0.1664792E+02 0.1330022E-02 0.1988876E+02 -0.6514020E-03
0.3725266E+05 0.3483195E-03 0.8216993E+01 -0.1565706E-02 0.9083579E+01 -0.2394756E-02
0.1249008E+05 0.3483195E-03 0.4035653E+01 -0.1785885E-01 0.4262660E+01 -0.4785992E-02
0.4542382E+04 0.1257799E-02 0.1953441E+01 -0.1020090E+00 0.2022135E+01 -0.1099932E-01
0.1774804E+04 0.4100610E-02 0.9230169E+00 -0.1402673E+00 0.9540612E+00 0.1890355E-01
0.7379086E+03 0.1214370E-01 s 1 1.0 0.4404638E+00 0.1771892E+00
0.3233538E+03 0.3269930E-01 0.42167649 1.0 p 1 1.0
0.1479156E+03 0.7899269E-01 s 1 1.0 0.19576859 1.0
0.6995969E+02 0.1654544E+00 0.18447904 1.0 p 1 1.0
0.3388577E+02 0.2803689E+00 s 1 1.0 0.08241492 1.0
0.1664792E+02 0.3311067E+00 s 1 1.0 p 1 1.0
0.8216993E+01 0.2025083E+00 s 1 1.0 0.03233179 1.0
0.4035653E+01 0.4050733E-01 0.02984186 1.0 p 1 1.0
0.2233923E-02 p 11 1.0 0.01162909 1.0
s 10 1.0 0.9634687E+04 0.9229357E-05 d 1 1.0
0.1774804E+04 -0.2118903E-04 0.2657004E+04 0.7037829E-04 0.9540612 1.0
0.7379086E+03 -0.1967637E-03 0.8301086E+03 0.4885070E-03 d 1 1.0
0.3233538E+03 -0.1200255E-02 0.2890658E+03 0.2685670E-02 0.4404638 1.0
0.1479156E+03 -0.5800989E-02 0.1103847E+03 0.1189442E-01 d 1 1.0
0.6995969E+02 -0.2197755E-01 0.4547807E+02 0.4188949E-01 0.19576859 1.0
0.3388577E+02 -0.6105816E-01 0.1988876E+02 0.1170035E+00 f 1 1.0
0.1664792E+02 -0.7638452E-01 0.9083579E+01 0.2383863E+00 0.9540612 1.0
0.8216993E+01 0.6754818E-01 0.4262660E+01 0.3415915E+00 f 1 1.0
0.4035653E+01 0.3557485E+00 0.2022135E+01 0.3207450E+00 0.4404638 1.0
0.1953441E+01 0.3734387E+00 0.9540612E+00 0.1331999E+00 g 1 1.0
0.9540612 1.0
****
```

```

P 0
s 17 1.0
0.2390974E+07      0.3779987E-05      0.1234188E+02      -0.4321087E-03      p 6 1.0
0.5346860E+06      0.1807995E-04      0.7074110E+01      0.2539890E-03      0.9215095E+01      -0.1121793E-02
0.1357325E+06      0.9565973E-04      0.4091213E+01      -0.2109565E-01      0.4880975E+01      -0.3088822E-02
0.3876087E+05      0.4146788E-03      0.2365843E+01      -0.7568822E-01      0.2635883E+01      -0.8314216E-02
0.1233934E+05      0.1581756E-02      0.1355618E+01      -0.1354170E+00      0.1433099E+01      0.9715775E-02
0.4339527E+04      0.5282425E-02      0.7627281E+00      0.4558199E-01      0.7745933E+00      0.1022075E+00
0.1670741E+04      0.1557918E-01      s 1 1.0      0.4109949E+00      0.2401691E+00
0.6978396E+03      0.4040765E-01      0.4175870E      1.0      p 1 1.0
0.3133616E+03      0.9087757E-01      s 1 1.0      0.2113886E      1.0
0.1499143E+03      0.1718884E+00      0.22046161      1.0      p 1 1.0
0.7572019E+02      0.2601371E+00      s 1 1.0      0.10407031      1.0
0.4001429E+02      0.2866758E+00      0.11122216      1.0      p 1 1.0
0.2192386E+02      0.1973053E+00      s 1 1.0      0.04842720      1.0
0.1234188E+02      0.6989209E-01      0.05313563      1.0      p 1 1.0
0.7074110E+01      0.1039484E-01      p 12 1.0      d 1 1.0
0.4091213E+01      0.1348799E-02      0.3913378E+04      0.5505268E-04      1.433099      1.0
0.2365843E+01      0.3998993E-03      0.1271029E+04      0.2881525E-03      d 1 1.0
s 8 1.0      0.4597804E+03      0.1562718E-02      0.7745933      1.0
0.7572019E+02      -0.1191578E-01      0.1829169E+03      0.6556857E-02      d 1 1.0
0.4001429E+02      -0.4067457E-01      0.7902836E+02      0.2244822E-01      0.4109949      1.0
0.2192386E+02      -0.6270366E-01      0.3661470E+02      0.6221732E-01      f 1 1.0
0.1234188E+02      -0.4263128E-02      0.1796340E+02      0.1371701E+00      1.433099      1.0
0.7074110E+01      0.1555822E+00      0.9215095E+01      0.2294781E+00      f 1 1.0
0.4091213E+01      0.3631948E+00      0.4880975E+01      0.2936591E+00      0.7745933      1.0
0.2365843E+01      0.4650685E+00      0.2635883E+01      0.2741997E+00      g 1 1.0
0.1355618E+01      0.3356829E+00      0.1433099E+01      0.1496193E+00      1.433099      1.0
                                0.7745933E+00      0.3411505E-01      ****
S 0
s 18 1.0
0.1437368E+08      0.4599494E-06      s 1 1.0      1.00357259      1.0      p 1 1.0
0.3488084E+07      0.1909847E-05      s 1 1.0      0.42758792      1.0
0.9485634E+06      0.9479210E-05      0.46429720      1.0      p 1 1.0
0.2865991E+06      0.3833679E-04      s 1 1.0      0.20082092      1.0
0.9538514E+05      0.1399083E-03      0.20270956      1.0      p 1 1.0
0.3466990E+05      0.4552525E-03      s 1 1.0      0.08655537      1.0
0.1364455E+05      0.1343980E-02      0.08280410      1.0      p 1 1.0
0.5764593E+04      0.3627065E-02      p 13 1.0      0.03368850      1.0
0.2592088E+04      0.9032679E-02      0.1694829E+05      0.5818042E-05      d 1 1.0
0.1229903E+04      0.2085470E-01      0.4877516E+04      0.4010388E-04      1.597934      1.0
0.6105212E+03      0.4463800E-01      0.1614204E+04      0.2490225E-03      d 1 1.0
0.3143459E+03      0.8778818E-01      0.6045134E+03      0.1201602E-02      0.8490678      1.0
0.1664410E+03      0.1551642E+00      0.2520823E+03      0.4684221E-02      d 1 1.0
0.8985191E+02      0.2359473E+00      0.1151777E+03      0.1479490E-01      0.42758792      1.0
0.4903169E+02      0.2807890E+00      0.5673954E+02      0.3871463E-01      f 1 1.0
0.2681499E+02      0.2184316E+00      0.2965480E+02      0.8504993E-01      1.597934      1.0
0.1457130E+02      0.8274414E-01      0.1618070E+02      0.1542032E+00      f 1 1.0
0.7800226E+01      0.9539611E-02      0.9069720E+01      0.2287842E+00      0.8490678      1.0
s 7 1.0      0.5139082E+01      0.2789933E+00      0.2529195E+00      g 1 1.0
0.1664410E+03      -0.3354175E-02      0.2896500E+01      0.2789933E+00      1.597934      1.0
0.8985191E+02      -0.1568849E-01      0.1597934E+01      0.1243926E+00      ****
0.4903169E+02      -0.4333698E-01      p 8 1.0
0.2681499E+02      -0.7092630E-01      0.5673954E+02      -0.1083096E-03
0.1457130E+02      -0.1059943E-01      0.2965480E+02      -0.5589229E-03
0.7800226E+01      0.1941045E+00      0.1618070E+02      -0.1869500E-02
0.4078241E+01      0.3608163E+00      0.9069720E+01      -0.3735310E-02
s 4 1.0      0.5139082E+01      -0.7489923E-02
0.1457130E+02      0.2244776E-03      0.2896500E+01      -0.1053618E-01
0.7800226E+01      -0.3171680E-02      0.1597934E+01      0.2509186E-01
0.4078241E+01      -0.5007939E-01      0.8490678E+00      0.1581995E+00
0.2064733E+01      -0.1661427E+00

```

```
C1 0
s 17 1.0
0.1482330E+08      0.5300036E-06      s 1 1.0
0.3245795E+07      0.2649974E-05      0.73998499      1.0
0.8031468E+06      0.1450988E-04      s 1 1.0
0.2225333E+06      0.6581952E-04      0.34617351      1.0
0.6841469E+05      0.2645080E-03      s 1 1.0
0.2312525E+05      0.9419436E-03      0.15381544      1.0
0.8515975E+04      0.3010961E-02      s 1 1.0
0.3385490E+04      0.8705665E-02      0.06432348      1.0
0.1439714E+04      0.2284909E-01      p 12 1.0
0.6489733E+03      0.5421235E-01      0.1342285E+05      0.1113187E-04
0.3072568E+03      0.1140771E+00      0.3866824E+04      0.7667306E-04
0.1514009E+03      0.2051172E+00      0.1275011E+04      0.4794787E-03
0.7693713E+02      0.2917007E+00      0.4734797E+03      0.2335426E-02
0.3995329E+02      0.2816841E+00      0.1948474E+03      0.9139682E-02
0.2100904E+02      0.1415268E+00      0.8743224E+02      0.2877779E-01
0.1108474E+02      0.2548877E-01      0.4209305E+02      0.7402114E-01
0.5814849E+01      0.1421752E-02      0.2139386E+02      0.1522906E+00
s 9 1.0
0.6489733E+03      -0.4106361E-03      0.1129498E+02      0.2436153E+00
0.3072568E+03      -0.2530926E-02      0.6095058E+01      0.3035689E+00
0.1514009E+03      -0.1070900E-01      0.3307835E+01      0.2613778E+00
0.7693713E+02      -0.3412307E-01      0.1776485E+01      0.1107208E+00
0.3995329E+02      -0.7086086E-01      p 6 1.0
0.2100904E+02      -0.5604441E-01      0.2139386E+02      -0.9628633E-03
0.1108474E+02      0.1110435E+00      0.1129498E+02      -0.3085380E-02
0.5814849E+01      0.3561520E+00      0.6095058E+01      -0.7464407E-02
0.3005201E+01      0.2301273E+00      0.3307835E+01      -0.9607563E-02
s 6 1.0
0.3995329E+02      0.9692920E-03      0.1776485E+01      0.4760197E-01
0.2100904E+02      0.9976198E-03      0.9289861E+00      0.2030286E+00
0.1108474E+02      -0.2572041E-02      p 1 1.0
0.5814849E+01      -0.3560502E-01      0.46544088      1.0
0.3005201E+01      -0.1530005E+00      p 1 1.0
0.1516208E+01      -0.9949557E-01      0.21983942      1.0
                                p 1 1.0
                                0.09631864      1.0
                                p 1 1.0
                                0.03851739      1.0
                                d 1 1.0
                                0.9289861      1.0
                                d 1 1.0
                                0.46544088      1.0
                                d 1 1.0
                                0.21983942      1.0
                                f 1 1.0
                                0.9289861      1.0
                                f 1 1.0
                                0.46544088      1.0
                                g 1 1.0
                                0.9289861      1.0
                                ****
```