

Cálculos MHHFCI para a molécula BH na base double-zeta

Antonio Moreira de C. Sobrinho*¹, Micael D. de Andrade*² e Luiz A. C. Malbouisson*³

* Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, Salvador, Brasil

Sinopse. São apresentados resultados de cálculos MRHFCI da energia total e do momento de dipolo elétrico permanente da molécula BH na base *double-zeta*.

A equação Hartree-Fock (HF) é não-linear e tem, em princípio, várias soluções [1]. Em trabalhos anteriores [2, 3] foi introduzido um método de *Interação de Configurações Multi-Referência*, baseado nas soluções HF (MRHFCI). Neste método, são empregados vários extremos HF como referência para expandir a função de estado. Para cada sistema são determinados diversos extremos HF com as adequadas simetrias da ponto e spin.

Com o ω^{th} extremo HF pode-se construir uma base do espaço *CI-completo*. Com o ω^{th} extremo HF é construída a base $\mathbf{B}^{\omega}$ e o conjunto de bases $\mathbf{B}^{\omega}$ é um sistema gerador, $\mathbf{G}$, do espaço *CI-completo*. Embora as bases $\mathbf{B}^{\omega}$ gerem o mesmo espaço, as correspondentes configurações dessas bases tem distintos *conteúdos de informação quantum mecânica* (QMCI). Desta forma, nós podemos usar bases mistas para formular o problema CI, isto é, bases multi-referência HF (MRHF) que incluem vetores de $\mathbf{G}$ originados de diferentes bases $\mathbf{B}^{\omega}$ [2 – 5], para calcular a energia e propriedades de moléculas usando reduzidas bases MRHF.

Neste trabalho, nós temos dezenove soluções HF $^1\Sigma^+$ obtidas para a molécula BH na base *double-zeta* (DZ). Foram construídas várias bases e no presente estágio estão sendo realizados os cálculos MRHFCI correspondentes. Alguns resultados iniciais para o momento de dipolo elétrico permanente são mostrados na Tabela 1. Nesta tabela, a primeira e a segunda coluna indicam, respectivamente, o número de configurações e os extremos HF utilizados no cálculo; a terceira e a quarta coluna indicam, respectivamente, a energia total e o momento de dipolo obtidos.

Tabela 1. Cálculos MRHFCI para o BH com bases DZ.*

CSFs	Soluções HF	Energia MRHFCI	μ
509	A, B	-25,1735411	1,2877
224	A, B	-25,1705878	1,2790
392	A, C	-25,1739969	1,2599
275	A, C	-25,1733817	1,2839
206	A, C	-25,1739570	1,2503
280	A, C	-25,1738091	1,2893
272	A, C	-25,1736121	1,2815
468	A, C	-25,1740046	1,2554
308	A, C	-25,1740030	1,2857
411	A, C	-25,1736892	1,2880
380	A, C	-25,1739150	1,2756
495	A, D	-25,1736018	1,2862
423	A, D	-25,1730140	1,2961
555	A, D	-25,1714961	1,2786
556	A, D	-25,1711144	1,2756
2575	<i>CI-completo</i>	-25,1740150	1,5246

* Energias das referências HF usadas (a.u.): A = -25,1133953; B = -22,3616984; C = -21,0350311; D = -3,9164023; Valor exp. dipolo: μ = 1.270 debye; Distância interatômica: R = 2.329 bohr.

Referências

- [1] L. A. C. Malbouisson and J. D. M. Vianna. *J. de Chimie Physique et de Physico-Chimie Biologique*. 87, 2017 (1990).
- [2] L. A. C. Malbouisson, M. G. R. Martins, N. Makiuchi. *Int. Journal of Quantum Chem.* 106, 2772 (2006).
- [3] A. M. de C. Sobrinho, M. A. C. Nascimento, M. D. de Andrade and L. A. C. Malbouisson. *Int. J. Quantum Chem.* 108, 2595 (2008).
- [4] L. A. C. Malbouisson, M. D. de Andrade and A. M. de C. Sobrinho. *Int. J. of Quantum Chem.* 112, 3409 (2012);
- [5] A. M. de C. Sobrinho, M. D. de Andrade, M. A. C. Nascimento and L. A. C. Malbouisson. *J. Mol. Model.* 20, 2382 (2014).

¹ E-mail: moreira@ufba.br ; amcs122011@gmail.com

² E-mail: micael@ufba.br

³ E-mail: lmalboui@ufba.br ; lmalboui@gmail.com