

Utilizando o Método HF^{Gauss} -GSA para Obtenção de uma Nova Base Atômica do tipo Double-Zeta para o Boro

Eduardo de Cerqueira Ribeiro*¹, Luiz Augusto Carvalho Malbouisson*² e Micael Dias de Andrade*³

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

Sinopse. Neste trabalho são apresentados os expoentes e os coeficientes de uma nova base atômica do tipo *Double-Zeta* para o átomo de Boro. Como obtido, a energia do estado fundamental Hartree-Fock para o Boro nessa nova base é menor que a energia para o Boro obtida com a base Double Zeta padrão.

Em trabalhos anteriores, foram construídas novas bases atômicas mínimas para os átomos da primeira linha da tabela periódica [1]. Tais bases foram obtidas através da otimização direta do funcional Hartree-Fock do átomo com o algoritmo *Generalized Simulated Annealing*, HF^{Gauss} -GSA. Recentemente, usando este algoritmo, foram obtidas novas bases atômicas *Double Zeta* (DZ) para os átomos de Lítio e Berílio [2]. As energias atômicas Hartree-Fock (HF) obtidas com estas novas bases são melhores que aquelas obtidas com as bases mínima e DZ padrão. Estas novas bases foram aplicadas em algumas moléculas formadas por átomos da primeira linha da tabela periódica, em cálculos de energias *Hartree-Fock* (HF) e *CI-completo* e para calcular momentos de dipolo elétrico permanente [2,3] e momento de quadrupolo elétrico [4] usando o método *Multi-Reference Hartree-Fock Configuration Interaction* (MRHFCI).

O método HF^{Gauss} -GSA consiste na otimização direta do funcional Hartree-Fock do átomo, tomando simultaneamente como parâmetros variacionais os coeficientes da expansão atômica orbital das funções de base e os coeficientes e expoentes das funções gaussianas que definem o conjunto de funções da base.

Por outro lado, as equações HF são não-lineares e tem, em princípio, várias soluções [5]. Desta forma, para cada sistema, pode-se determinar diversas soluções Hartree-Fock com as simetrias de ponto e spin adequadas. Pode-se utilizar então cada um dos extremos HF para construir uma base do espaço *CI-completo*. No método MRHFCI são empregados vários extremos HF como referências para expandir a função de estado.

Neste trabalho utiliza-se o método HF^{Gauss} -GSA para obter uma nova base DZ para o átomo de Boro. Foram implementadas modificações no código FORTRAN do HF^{Gauss} -GSA e, no presente estágio, estão sendo realizados ajustes para obtenção dos melhores parâmetros GSA (q_A , q_V e q_T) para este particular processo de otimização. A nova base obtida com esta abordagem será usada em cálculos MRHFCI para sistemas envolvendo átomos de Boro.

Referências

- [1] M. D. de Andrade, M. A. C. Nascimento, K. C. Mundim, A. M. de C. Sobrinho and L. A. C. Malbouisson. *Int. Journal of Quantum Chemistry*, 108, 2486 (2008).
- [2] A. M. de C. Sobrinho, M. D. de Andrade, M. A. C. Nascimento and L. A. C. Malbouisson. *J. Mol. Model.*, 20, 2382 (2014).
- [3] (a) L. A. C. Malbouisson, M. G. R. Martins and N. Makiuchi, *Int. J. Quantum Chem.*, 106, 2772 (2006); (b) A. M. C. Sobrinho, M. A. C. Nascimento, M. D. de Andrade and L. A. C. Malbouisson. *Int. J. of Quantum Chem.*, 108, 2595 (2008); (c) L. A. C. Malbouisson, M. D. de Andrade and A. M. de C. Sobrinho. *Int. J. of Quantum Chem.*, 112, 3409 (2012);
- [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) W. H. Adams. *Phys. Rev.*, 127, 1650 (1962); (b) R. E. Stanton. *J. Chem. Phys.*, 48, 258 (1968); (c) L. A. C. Malbouisson, J. D. M. Vianna. *J. Chim. Phys.*, 87, 2017 (1990); (d) R. M. Teixeira Filho, L. A. C. Malbouisson and J. D. M. Vianna. *J. Chim. Phys.*, 90, 1999 (1993).

¹ E-mail: eduardocerqueiraribeiro@gmail.com

² E-mail: lmalboui@ufba.br; lmalboui@gmail.com

³ E-mail: micael@ufba.br