

A representação de orbitais STO por n funções Gaussianas (STO-nG) proporciona uma boa descrição da função de onda, exceto em regiões próximas ao núcleo e torna conveniente o cálculo de integrais moleculares. A determinação de funções empíricas para a modelagem de expoentes de STO's (representadas por STO-6G's) em nível HF está descrita na literatura. [1] Nesse trabalho a modelagem foi estendida para expoentes de STO's (representadas por STO-8G's) com correlação eletrônica de Möller-Plesset até segunda ordem (MP2).

Foi seguido o formalismo proposto por Laschuk. [1] A geometria de várias espécies foi otimizada com uma base 6-311G(d,p), difusa (++) para ânions, em nível MP2. Foram determinados os expoentes ótimos de STO's para cada átomo em cada espécie. Os expoentes foram ajustados à funções empíricas. Os parâmetros da expansão STO-8G utilizados foram determinados por O-ohata e colaboradores. [2] Os cálculos quânticos foram realizados no Gaussian 98. [3]

A diferença média de energia obtida para as espécies no nível MP2 com base 6-311G(d,p) e os respectivos valores obtidos com base STO (expoentes otimizados) é de 0,7047626 h. Essa diferença é menor que a obtida no nível HF. [1] O erro médio adicional causado pelo uso dos expoentes determinados a partir das funções empíricas é de 1,6904 mh.

Referências.

1. E. F. Laschuk, Novo Formalismo Semi-Empírico para Cálculos Químico-Quânticos, Tese de Doutorado, UFRGS, 2005.
2. K. O-ohata, H. Taketa, S. Huzinaga, Journal of the Physical Society of Japan **21**(11), 2306-2313 (1966).
3. M. J. Frisch *et. al.*, Gaussian 98, Revision A.9, Gaussian, Inc., Pittsburgh (1998).