



CONJUNTO DE BASES UNIVERSAIS PARA OS ESTADOS EXCITADOS DE ALGUNS ÍONS POSITIVOS E NEGATIVOS

Cezar Laurence Barros

Departamento de Engenharia Química e Mecânica
Mestre em Física
Professor da Faculdade de Aracruz - UNIARACRUZ
cezar@fsjb.edu.br

RESUMO

O método coordenada geradora Hartree-Fock é utilizado para gerar um conjunto de bases universais (UBSs) de funções do tipo gaussianas e do tipo *Slater* para os estados excitados mais baixos de íons positivos e negativos. As energias calculadas com o nosso conjunto de bases são comparadas com os correspondentes resultados obtidos com outros (UBSs) de funções *Slater* totalmente otimizados.

Palavras-chave: Íons. Coordenada geradora. Bases universais.

ABSTRACT

The Hartree-Fock coordinate generator method is used to generate a set of universal bases (UBSs) of Gaussian and Slater-type functions for low-lying excited states of some mono positive and negative ions. From our sets of bases, the total energy is calculated and compared with the corresponding results obtained from other UBSs and from fully-optimized STF's base sets.

Keywords: Ions. Generator coordinate. Universal bases.

INTRODUÇÃO

O conceito de trajetória não existe no mundo subatômico. Cada partícula subatômica, possui um comportamento ondulatório. A função de onda associada a cada partícula pode ser construída por um conjunto de funções conhecidas, por exemplo, as funções gaussianas. A esse conjunto de funções se dá o nome de conjunto de bases universais (UBSs).

Para se construir a função de onda de um átomo, por exemplo, calculamos a função de onda de cada elétron, também chamado de *spin* orbital, desse átomo.

O conceito de conjunto de bases universais foi desenvolvido primeiramente por Silver e colaboradores (1978). Essas bases, em geral, possuem um número muito grande de funções e apresentam um erro considerável em cálculos moleculares. A grande vantagem de se utilizar os UBSs se dá pela flexibilidade desse tipo de conjunto. Pode-se utilizar o mesmo UBSs para calcular a função de ondas de diferentes estruturas moleculares e atômicas Mezley (1979). As UBSs têm melhorado um série de cálculos atômicos, levando-se em conta efeitos relativísticos e não relativísticos, conforme Clementi e Conrungi (1982), Bernard e colaboradores (1987), Jorge e Fantin (1999), Jorge e Franco (2000). Para se construir a nossa UBSs, utilizamos o método Hartree Fock (HF).

Mohallem e colaboradores (1996) desenvolveram o método da coordenada geradora HF (GCHF). Esse método foi utilizado com sucesso para gerar um conjunto de bases universais de funções *Slater* e gaussianas (GTFs e STFs, respectivamente), de acordo com Da Silva e Trsic (1996), Jorge e Martins (1998), Jorge e Fantim (1999), Jorge e Franco (2000), Mohalem e Colaboradores (1996), Da Costa e colaboradores (1987), Jorge e Muniz (1999), Jorge e Aboul Hosn (2001).

Recentemente, foram geradas UBSs de GTFs (JORGE; FRANCO, 2000) para íons positivos no estado fundamental de H até Xe e STFs (JORGE; MARTINS, 1998; JORGE; FANTIM, 1999) para átomos neutros, no estado fundamental, de H até Xe. Neste trabalho, utilizamos as UBSs Jorge e Martins (1998), Jorge e Fantim (1999) e Jorge e Franco (2000) para incluir os estados excitados mais baixos dos íons positivos e negativos presentes nas Tabelas 1 e 2. As energias HF, que foram

calculadas, são comparadas com os melhores resultados encontrados na literatura, conforme Da Silva e Trisic (1996), Clementi e Roetti (1974).

TEORIA

O método GCHF Mohalem e colaboradores (1996) é baseado na superposição da função de onda de um elétron.

$$\Psi_d(1) = \int \phi_d(1, \alpha) f_d(\alpha) d\alpha \quad (1)$$

Tabela 1. Energias totais HF (em hartree) para os estados excitados mais baixos de alguns íons positivos

Z	Íon	Configuração	Estado	GTFs (Este trabalho)	E (UBS) ^a (Este trabalho)	E (UBS) ^b 18s12p11d	STFs (Este trabalho)	E(UBS) ^c (Este trabalho)	E(UBS) ^d 12s10p10d
21	Sc ⁺	[Ar]4s ⁰ 3d ²	³ F	20s13p10d	-759.5083218	-759.49974	13s10p8d	-759.5098454	-759.50957
21	Sc ⁺	[Ar]4s ²	¹ S	20s13p	-759.4573952	-759.45097	13s10p	-759.4619117	-759.46186
22	Ti ⁺	[Ar]4s ⁰ 3d ³	⁴ F	20s13p10d	-848.1855365	-848.17539	14s10p7d	-848.1868477	-848.18675
22	Ti ⁺	[Ar]4s ² 3d ¹	² D	20s13p10d	-848.0669332	-848.04422	14s10p7d	-848.0717713	-848.05617
23	V ⁺	[Ar]4s ² 3d ²	³ F	20s13p10d	-942.4926963	-942.48522	13s10p7d	-942.4982781	-942.49804
24	Cr ⁺	[Ar]4s ¹ 3d ⁴	⁶ D	20s13p10d	-1043.090019	-1043.0823	12s10p7d	-1043.096791	-1043.0965
24	Cr ⁺	[Ar]4s ² 3d ³	⁴ F	20s13p10d	-1042.960086	-1042.8747	12s10p7d	-1042.966808	-1042.8897
25	Mn ⁺	[Ar]4s ⁰ 3d ⁶	⁵ D	21s13p10d	-1149.519994	-1149.5045	12s10p8d	-1149.521191	-1149.5206
25	Mn ⁺	[Ar]4s ² 3d ⁴	⁵ D	21s13p10d	-1149.365867	-1149.3517	12s10p8d	-1149.369015	-1149.3684
26	Fe ⁺	[Ar]4s ² 3d ⁵	⁶ S	20s13p10d	-1262.115524	-1262.1052	12s10p8d	-1262.125740	-1262.1248
27	Co ⁺	[Ar]4s ² 3d ⁶	⁵ D	20s13p10d	-1380.996535	-1380.9849	13s10p7d	-1381.009240	-1381.0080
28	Ni ⁺	[Ar]4s ² 3d ⁷	⁴ F	20s13p10d	-1506.416877	-1506.4037	13s10p8d	-1506.432421	-1506.4310
29	Cu ⁺	[Ar]4s ² 3d ⁸	³ F	20s13p10d	-1638.465296	-1638.4471	13s10p8d	-1638.47950	-1638.4780
33	As ⁺	[Ar]4s ² 3d ¹⁰ 4p ²	¹ D	22s15p11d	-2233.832467	-2233.789	13s10p8d	-2233.838669	-2233.8375
33	As ⁺	[Ar]4s ² 3d ¹⁰ 4p ²	¹ S	22s15p11d	-2233.760818	-2233.7177	13s10p8d	-2233.767367	-2233.7662
34	Se ⁺	[Ar]4s ² 3d ¹⁰ 4p ³	² D	21s16p11d	-2399.472505	-2399.4224	13s10p8d	-2399.477083	-2399.4756
34	Se ⁺	[Ar]4s ² 3d ¹⁰ 4p ³	² P	21s16p11d	-2399.419492	-2399.3695	13s10p8d	-2399.424057	-2399.4226
35	Br ⁺	[Ar]4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁴	¹ D	22s16p11d	-2571.98438	-2571.9261	13s10p9d	-2571.986866	-2571.9849
35	Br ⁺	[Ar]4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁴	¹ S	22s16p11d	-2571.898635	-2571.8404	13s10p9d	-2571.901213	-2571.8993
40	Zr ⁺	[Kr]5s ⁰ 4d ³	⁴ F	23s16p12d	-3538.805166	-3538.6903	13s10p9d	-3538.810476	-3578.7698
40	Zr ⁺	[Kr]5s ² 4d ¹	² D	23s16p12d	-3538.714256	-3538.5848	13s10p9d	-3538.719082	-3578.6994
41	Nb ⁺	[Kr]5s ¹ 4d ³	⁵ F	22s16p13d	-3753.350257	-3753.2205	13s10p9d	-3753.360731	-3753.3496
41	Nb ⁺	[Kr]5s ² 4d ²	³ F	22s16p13d	-3753.205415	-3753.0728	13s10p9d	-3753.216004	-3753.2047
42	Mo ⁺	[Kr]5s ¹ 4d ⁴	⁶ D	23s16p13d	-3975.244787	-3975.0862	13s10p9d	-3975.248993	-3975.2345
42	Mo ⁺	[Kr]5s ² 4d ³	⁴ F	23s16p13d	-3975.054539	-3974.8959	13s10p9d	-3975.058603	-3975.0440
43	Tc ⁺	[Kr]5s ⁰ 4d ⁶	⁵ D	26s16p13d	-4204.561073	-4204.3828	13s10p9d	-4204.562529	-4204.5438
43	Tc ⁺	[Kr]5s ² 4d ⁴	⁵ D	26s16p13d	-4204.321272	-4204.1429	13s10p9d	-4204.321935	-4204.3038
44	Ru ⁺	[Kr]5s ¹ 4d ⁶	⁶ D	25s16p13d	-4441.275855	-4441.0778	13s10p9d	-4441.276450	-4441.2548
44	Ru ⁺	[Kr]5s ² 4d ⁵	⁶ S	25s16p13d	-4441.128889	-4440.9216	13s10p9d	-4441.129287	-4441.1076
45	Rh ⁺	[Kr]5s ¹ 4d ⁷	⁵ F	25s17p14d	-4685.576924	-4685.3472	13s10p9d	-4685.577199	-4685.5522
45	Rh ⁺	[Kr]5s ² 4d ⁶	⁵ D	25s17p14d	-4685.354548	-4685.1250	13s10p9d	-4685.354878	-4685.3300
46	Pd ⁺	[Kr]5s ¹ 4d ⁸	⁴ F	24s17p13d	-4937.563101	-4937.3010	13s10p9d	-4937.554091	-4937.5200
46	Pd ⁺	[Kr]5s ² 4d ⁷	⁴ F	24s17p13d	-4937.283197	-4937.0337	13s10p9d	-4937.284805	-4937.2577
47	Ag ⁺	[Kr]5s ¹ 4d ⁹	³ D	24s17p13d	-5197.268687	-5196.9912	13s10p9d	-5197.270260	-5197.2432
47	Ag ⁺	[Kr]5s ² 4d ⁸	³ F	24s17p13d	-5196.965419	-5196.6879	13s10p9d	-5196.967181	-5196.9399
48	Cd ⁺	[Kr]5s ² 4d ⁹	² D	25s16p14-d	-5464.486332	-5464.1867	13s10p9d	-5464.486950	-5464.4607

^aEnergias totais HF obtidas com nosso conjunto de base universal (UBS) de GTFs^bEnergias totais HF obtidas com o UBS de GTFs gerado por da Silva e Trsic (1996).^cEnergias totais HF obtidas com nosso UBS de STFs^dEnergias totais HF obtidas com o UBS de STFs gerado por da Silva e Trsic (1996)

Tabela 2. Energias totais HF (em hartree) para os estados excitados mais baixos de alguns íons negativos

Z	Íon	Configuração	Estado	GTFs (Este trabalho)	E(UBS) ^a (Este trabalho)	E(UBS) ^b 18s12p11d	STFs (Este trabalho)	E(UBS) ^c (Este trabalho)	E(UBS) ^d 13s11p10d
5	B ⁻	[He]2s ² 2p ²	¹ D	20s11p	-24.49049231	-24.487401	13s11p	-24.49061788	-24.489541
5	B ⁻	[He]2s ² 2p ²	¹ S	20s11p	-24.45552725	-24.445557	13s11p	-24.45615635	-24.450557
6	C ⁻	[He]2s ² 2p ³	² D	20s11p	-37.64241839	-37.642203	13s9p	-37.64258844	-37.64257
6	C ⁻	[He]2s ² 2p ³	² P	20s11p	-37.60073374	-37.600209	13s9p	-37.60090824	-37.600823
7	N ⁻	[He]2s ² 2p ⁴	¹ D	20s11p	-54.26677466	-54.266697	12s9p	-54.26693840	-54.266933
7	N ⁻	[He]2s ² 2p ⁴	¹ S	20s11p	-54.18669218	-54.186586	12s9p	-54.18690662	-54.186896
13	Al ⁻	[Ne]3s ² 3p ²	¹ D	26s18p	-241.8569095	-241.84805	13s10p	-241.8567853	-241.85425
13	Al ⁻	[Ne]3s ² 3p ²	¹ S	26s18p	-241.8310474	-241.81201	13s10p	-241.8300342	-241.82221
14	Si ⁻	[Ne]3s ² 3p ³	² D	19s14p	-288.8391122	-288.83823	13s11p	-288.8416191	-288.84149
14	Si ⁻	[Ne]3s ² 3p ³	² P	19s14p	-288.8430537	-288.80709	13s11p	-288.8455076	-288.81094
15	P ⁻	[Ne]3s ² 3p ⁴	¹ D	19s14p	340.6575972	-340.6566	13s10p	-340.6599841	-340.65994
15	P ⁻	[Ne]3s ² 3p ⁴	¹ S	19s14p	-340.6008261	-340.59976	13s10p	-340.6034131	-340.60333
21	Sc ⁻	[Ar]4s ¹ 3d ³	⁵ F	23s14p10d	-759.5918637	-759.58216	13s11p9d	-759.59633844	-759.58826
22	Ti ⁻	[Ar]4s ¹ 3d ⁴	⁶ D	23s24p10d	-848.2558440	-848.24308	13s10p8d	-848.2587160	-848.25718
23	V ⁻	[Ar]4s ¹ 3d ⁵	⁷ S	24s14p10d	-942.7618935	-942.73411	13s11p8d	-942.7664132	-942.76553
24	Cr ⁻	[Ar]4s ¹ 3d ⁶	⁶ D	24s14p10d	-1043.093291	-1043.0736	13s11p8d	-1043.097448	-1043.0966
28	Ni ⁻	[Ar]4s ¹ 3d ¹⁰	² S	24s15p10d	-1506.654154	-1506.6113	14s12p8d	-1506.664620	-1506.6623
32	Ge ⁻	[Ar]4s ² 3d ¹⁰ 4p ³	² D	24s17p10d	-2075.360370	-2075.2500	13s11p8d	-2075.361693	-2075.3438
33	As ⁻	[Ar]4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁴	¹ D	24s17p10d	-2234.183456	-2234.0754	13s11p9d	-2234.184910	-2234.1804
33	As ⁻	[Ar]4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁴	¹ S	24s17p10d	-2234.129133	-2234.0213	13s11p9d	-2234.130547	-2234.1262
39	Y ⁻	[Kr]5s ¹ 4d ³	⁵ F	25s16p13d	-3331.597888	-3331.2982	13s11p10d	-3331.605071	-3331.5878
41	Nb ⁻	[Kr]5s ¹ 4d ⁵	⁷ S	25s16p14d	-3753.557090	-3753.1285	14s10p10d	-3753.560639	-3753.5505
42	Mo ⁻	[Kr]5s ¹ 4d ⁶	⁶ D	26s15p14d	-3975.401608	-3974.8977	14s10p10d	-3975.401776	-3975.1677
43	Tc ⁻	[Kr]5s ¹ 4d ⁷	⁵ F	26s16p14d	-4204.684111	-4204.0919	14s10p10d	-4204.684461	-4204.6782

^aEnergias totais HF obtidas com nosso conjunto de base universal (UBS) de GTFs^bEnergias totais HF obtidas com o UBS de GTFs gerado por da Silva e Trsic (1996)^cEnergias totais HF obtidas com nosso UBS de STFs^dEnergias totais HF obtidas com o UBS de STFs gerado por da Silva e Trsic (1996)

Onde n é o número da função de um elétron do sistema, ϕ_i são as funções geradoras (GTFs e STFs no nosso caso), f_i são as autofunções e α é a coordenada geradora. Utilizando a equação (1) no determinante de *Slater* para funções de onda multieletrônicas, minimizamos a energia total E em relação a $f_i(\alpha)$ e obtivemos as equações GWHF

$$\int [F(\alpha, \beta) - \varepsilon_i S(\alpha, \beta)] f_i(\beta) d\beta = 0 \quad i = 1, \dots, n \quad (2)$$

Onde F e S são os núcleos de Fock e recobrimento, respectivamente (para maiores detalhes sobre esses núcleos, veja Mohallem e colaboradores (1986)).

As equações de GWHF são integradas utilizando a técnica de discretização integral (ID) Mohallem (1986). A técnica ID é implementada trocando-se o rótulo da coordenada geradora espacial,

$$\Omega = \ln \frac{\alpha}{A} \quad A > 1 \quad (3)$$

Onde A é determinado numericamente por um fator de escala. A nova coordenada geradora espacial Ω é dividida por N pontos igualmente espaçados. $\{\Omega_i\}$ é selecionado para se obter uma integração adequada dos subníveis s , p e d das autofunções dos vários estados excitados mais baixos estudados aqui. Essas integrações se caracterizam por começar por um ponto chamado de $\Omega_{\min}$, onde $\Delta\Omega$ é o incremento e N é o número de pontos. O maior valor da coordenada geradora é dado por:

$$\Omega_{\max} = \Omega_{\min} + (N - 1)\Delta\Omega \quad (4)$$

O número de pontos de discretização é dado pelo tamanho da base. O valor atribuído para N é em função também da precisão dos resultados.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

O método GCHF apresentado na seção 2 foi utilizado para gerar expoentes de GTFs e STFs para os estados excitados mais baixos de cátions e ânions contidos nas Tabelas 1 e 2, respectivamente. Nos cálculos, utilizamos o fator de escala A (veja

eq. (3)) igual a 6.0. Para cada estado de cada íon, otimizamos o parâmetro de discretização $\Omega_{\min}$ para cada simetria s, p e d. Todos os cálculos foram feitos usando uma versão modificada do programa ATOMSCF, conforme Chakravorty e colaboradores, (1989). O processo de otimização foi repetido até que o valor da energia não mudasse de maneira significativa. Foram usados um incremento ($\Delta\Omega$) para todas as simetrias de todos os íons para gerar um conjunto de bases de GTFs e STFs que são, respectivamente, 0.1270, segundo Jorge e Franco (2000), e 0.0663, conforme Jorge e Martins (1998) e Jorge e Fantim (1999). Essas UBSs de GTFs e STFs presentes neste trabalho são subconjuntos das UBSs construídas por Jorge e Franco (2000), Jorge e Martins (1998) e Jorge e Fantim (1999), respectivamente. Em suma, geramos um único conjunto de bases de GTFs para descrever o estado fundamental conforme Jorge e Franco (2000) e alguns íons positivos e negativos nos estados excitados mais baixos de H até Xe e, além disso, um único conjunto de STFs para descrever átomos neutros de acordo com Jorge e Martins (1998), no estado fundamental conforme Jorge e Fantim (1999) e alguns cátions e ânions nos estados excitados mais baixos de H até Xe.

As Tabelas 1 e 2 mostram as energias totais HF (em Hartree) para os estados excitados para os estados excitados mais baixos para alguns íons positivos e negativos, respectivamente, calculadas com os UBSs de GTFs e STFs.

Observando a Tabela 1, verificamos que nossas UBSs de GTFs, para todos os cátions estudados aqui, são maiores em tamanho que as UBSs de GTFs geradas por Da Silva e Trisic (1996) e que nossas energias totais são melhores que as correspondentes calculadas por Da Silva e Trisic (1996). As diferenças entre as energias totais nessas duas aproximações estão em torno de 0.30 hartree para o Cd^+ . Nossas UBSs de STFs são menores que as UBSs de STFs geradas por Da Silva e Trisic (1996) e, além disso, nossas energias totais são melhores que as correspondentes calculadas por Da Silva e Trisic (1996). A maior diferença de energia calculada nas duas aproximações é em torno de 0.03 hartree para o Pd^+ . Com exceção do Sc^+ e do As^+ até Br^+ , nossas energias totais obtidas com os UBSs de STFs são mais estáveis que as UBSs de STFs totalmente otimizadas calculadas por Clementi e Roetti (1974). Clementi e Roetti (1974) geraram um conjunto de bases adaptadas, onde cada íon estudado nesse trabalho tinha o seu

conjunto de base específico. Uma extensiva discussão sobre bases adaptadas e UBSs é desenvolvida por Jorge e colaboradores (1996).

Para os íons negativos presentes na Tabela 2, nossas UBSs de GTFs e STFs são, respectivamente, maiores e menores que as UBSs de GTFs e STFs geradas por Da Silva e Trisc (1996). Para todos os ânions, nossas energias totais são melhores que as correspondentes obtidas pelas UBSs de Da Silva e Trisc (1996). A maior diferença de energia encontrada entre as UBSs de GTFs e STFs gerada com as duas aproximações presentes na Tabela 2 é em torno de 0.59 e 0.33 hartree, respectivamente. Com exceção do As^- (nos estados D^1 e S^1), nossas UBSs de STFs são mais precisas que as bases totalmente otimizadas calculadas por Clementi e Roetti (1974).

A razão pela qual nossas UBSs são mais precisas que as UBSs de Da Silva e Trisc (1996) é que esses autores fixaram o valor do ($\Omega_{\min}$) das simetrias s, p e d de todos os íons estudados aqui, enquanto nós otimizamos o $\Omega_{\min}$ de cada simetria de cada íon presente nas Tabelas 1 e 2.

CONCLUSÕES

Com os resultados obtidos neste trabalho e nos trabalhos de Jorge e Martins (1998), Jorge e Fantin (1999), Jorge e Franco (2000), concluimos que é possível gerar um único conjunto de bases de GTFs ou STFs para descrever os estados fundamental e excitado de um conjunto de sistemas atômicos.

Para todos os íons positivos e negativos nos estados excitados mais baixos, presentes nas Tabelas 1 e 2, nossas energias totais HF são melhores que as correspondentes calculadas por Da Silva e Trisc (1996). Além disso, em geral, os resultados obtidos por nossas UBSs de STFs são melhores que os encontrados por Clementi e Roetti (1974) usando STFs totalmente otimizadas.

REFERÊNCIAS

- 1 COOPER, D. L.; GERRAT, J.; RAIMONDI, M. The electronic structure of the benzene molecule. **Mol. Phys.**, p. 60 -1193, 1987.

- 2 CLEMENTI, E.; CHAKRAVORTY, S. J.; CORONGIU, G.; FLORES, J. R.; SONNAD, V. **Modern Techniques in Computational Chemistry** - MOTECC-91, Clementi E., Editor, pp. 23-113, Escom, Leiden, 1991.
- 3 CLEMENTI, E.; ROETTI, C. **The multipole expansion method**. At. Data Nucl. Data Tables 14 -177, 1974.
- 4 CORONGIU, G.; CLEMENTI, E. Solvated water molecules and hydrogen-bridged networks in liquid water. **J. Chem. Phys.**, m. 98, p. 2241-2249, 1993.
- 5 COSTA, H. F. M.; TRSIC, M.; MOHALLEM, J. R. Universal gaussian and slater type basis sets for atoms he to ar based on an integral version of the hartree-fock equations. **Molecular Physics**, Inglaterra, v. 62, n. 1, p. 91-95, 1987.
- 6 SILVA, A. B. F.; TRSIC, M. Gaussian and slater-type bases for ground and certain low-lying excited states of positive and negative ions of the atoms H through Xe based on the generator coordinate Hartree-Fock method. **Canadian Journal of Chemistry**, Canadá, v. 74, p. 1526-1534, 1996.
- 7 GIORDAN, M.; CUSTODIO, R.; MORGON, N. Basis set modeling for molecular calculations using effective core potential. **Journal of Computational Chemistry**, v. 18, p. 1918-1929, 1997.
- 8 JORGE, F. E.; HOSN, H. M. A. Gaussian basis sets for isoelectronic series of the atoms He to Ne. **Chemical Physics**, v. 264, p. 255-265, 2001.
- 9 JORGE, F. E.; BOBBIO, T. B.; SILVA, A. B. F. Adapted gaussian basis sets for the relativistic closed-shell atoms from helium through barium generated with the generator coordinate dirac-fock method. **Chemical Physics Letters**, v. 263, p. 775-782, 1996.
- 10 JORGE, F. E.; FANTIN, P. A. A universal basis set for cations and anions generated with the generator coordinate hartree-fock method. **Chemical Physics**, v. 249, n. 2, p. 105-111, 1999.
- 11 JORGE, F. E.; FRANCO, M. L. A universal gaussian basis sets for positive and negative ions from H through xe. **Chemical Physics**, v. 253, p. 21-26, 2000.
- 12 JORGE, F. E.; MARTINS, R. F. Accurate universal basis Sset for H through xe for hartree- fock calculations. **Chemical Physics**, v. 233, p. 1-7, 1998.
- 13 JORGE, F. E.; MUNIZ, E. P. Accurate adapted gaussian basis sets for the atoms from H through xe. **International Journal of Quantum Chemistry**, v. 71, n. 4, p. 307-312, 1999.
- 14 MALLI, G.; STYSZYNSKI, J. Theoretical study of rotational-echo double-resonance and related experiments. **J. Chem. Phys**, n.101, p. 1736, 1994.
- 15 MOHALLEM, J. R. A further study on the discretization of the gHW equation. **Zeitschrift Fur Physik D: Atoms, Molecules And Clusters**, Alemanha, v. 3, p. 339-344, 1986.

- 16 MOHALLEM, J. R.; DREIZLER, R. M.; TRSIC, M. A griffin-hill-wheeler version of the hartree-fock equations. **International Journal of Quantum Chemistry**, v. 20S, p. 45-55, 1986.
- 17 KOBUS, J.; MONCRIEFF, D.; WILSON, S. A comparison of finite difference and finite basis set Hartree-Fock calculations for the ground state potential energy curve of CO. **J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.**, v. 27, p. 5139 - 5147, 1994.
- 18 SILVER, D. M.; WILSON, S.; NIEUWPOORT, W. C. Universal atomic bases sets. **Int. J. Quantum Chem**, v. 14, p. 635, 1978.